

519.7

Ж 30

Кафаров

М. Б. Глебов

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОСНОВНЫХ ПРОЦЕССОВ ХИМИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДСТВ

Допущено Государственным комитетом СССР
по народному образованию в качестве
учебного пособия для студентов химико-
технологических специальностей высших
учебных заведений



Москва «Высшая школа» 1991

ББК 22.18
К30
УДК 519.7

Рецензенты: кафедра химии и технологии основного органического синтеза Московского института тонкой химической технологии (зав. кафедрой докт. техн. наук проф. В.С. Тимофеев); чл.-корр. АН СССР П.Г. Ромашков

Кафаров В.В., Глебов М.Б.
К 30 Математическое моделирование основных процессов химических производств: Учеб. пособие для вузов. — М.: Высш. шк., 1991. — 400 с.: ил.

ISBN 5-06-002066-5

Книга посвящена математическому моделированию химико-технологических процессов, их оптимизации и проектированию. Рассмотрены гидромеханические, массообменные и теплообменные процессы. Изложенный материал позволяет студентам исследовать процессы методом математического моделирования, включая составление математического описания, выбор метода решения, программную реализацию модели и проверку адекватности модели реальному объекту.

К 1602110000 — 381
001 (01) — 91 76 — 91

ББК 22.18
517.8

Учебное издание

Кафаров Влостор Вячеславович
Глебов Михаил Борисович

Математическое моделирование
основных процессов химических производств

Зав. редакцией Е.С. Гридасова. Редактор А.М. Суходский. Мл. редактор Н.А. Власова. Художественный редактор В.И. Пономаренко. Технический редактор Т.Д. Гарина. Корректор В.В. Кожуткина. Оператор О.М. Есипова.

ИБ № 9127

Изд. № ФМ-956. Сдано в набор 15.08.90. Подп. в печать 02.08.91.
Формат 60x88/16. Бумага тип. № 2. Гарнитура Пресс-Роман. Печать офсетная.
Объем 24,5 усл. печ. л. 24,5 усл. кр.-отт. 23,28 уч. изд. л.
Тираж 11000 экз. Зак. № 1278. Цена 1 р. 80 к.

Издательство "Высшая школа", 101430, Москва, ГСП-4, Неглинная ул., д. 29/14.
Набрано на наборно-литографических машинах издательства.

Отпечатано в Московской типографии № 4 Госкомпечати СССР, 129041, Москва,
б. Порецкая ул., 46.

ISBN 5-06-002066-5

© В.В. Кафаров, М.Б. Глебов. 1991

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	4
Глава I. Математическое моделирование как основной метод решения задач оптимизации и проектирования химико-технологических процессов	6
§ 1.1. Математическое моделирование	6
§ 1.2. Основные виды математических моделей	9
§ 1.3. Физическое описание природы объекта	11
§ 1.4. Составление математического описания объекта	12
§ 1.5. Выбор метода решения и реализации его в виде алгоритма решения и моделирующей программы	19
§ 1.6. Блочный принцип построения математических моделей	21
Глава II. Идентификация параметров и установление адекватности моделей	23
§ 2.1. Статистическое оценивание числовых характеристик случайных процессов	24
§ 2.2. Параметрическая идентификация моделей	31
§ 2.3. Проверка адекватности моделей	43
Глава III. Математическое описание структуры потоков в аппарате — основа построения моделей	57
§ 3.1. Методы исследования структуры потоков	58
§ 3.2. Основные характеристики распределения элементов потока по времени пребывания в аппарате (моменты функции распределения)	67
§ 3.3. Модели идеального смешения и идеального вытеснения	72
§ 3.4. Диффузионная модель	75
§ 3.5. Ячеечная модель	101
§ 3.6. Ячеечная модель с обратными потоками (рециркуляционная)	112
§ 3.7. Комбинированные модели	118
§ 3.8. Оценка структуры потоков в аппарате с помощью λ -и x -функций	141
Глава IV. Моделирование гидромеханических процессов	148
§ 4.1. Описание движения частиц в газе и жидкости	149
§ 4.2. Модель периодического осаждения суспензий	162
§ 4.3. Модель непрерывного осаждения	164
§ 4.4. Периодическое расслаивание неоднородных жидких смесей	168
§ 4.5. Непрерывное расслаивание в аппаратах с горизонтальным течением	172
§ 4.6. Непрерывное расслаивание в аппаратах вертикального типа	176
Глава V. Моделирование теплообменных процессов	178
§ 5.1. Конвективный теплообмен	180
§ 5.2. Учет стохастической составляющей при описании процесса теплообмена	196
§ 5.3. Моделирование работы рекуперативных теплообменных аппаратов	199
§ 5.4. Постановка задач оптимизации теплообменных аппаратов	216
§ 5.5. Диалоговая система оптимизации теплообменника типа "труба в трубе"	219
Глава VI. Моделирование массообменных процессов	225
§ 6.1. Основные этапы составления математического описания процессов	225
§ 6.2. Описание равновесия жидкость — пар (газ) и жидкость — жидкость. Основные типы задач и алгоритмы их решения	226
§ 6.3. Детерминированный и стохастический подходы к описанию массопереноса	237
§ 6.4. Массопередача в системах жидкость — пар (газ) и жидкость — жидкость	242
§ 6.5. Ректификация многокомпонентных смесей	244
§ 6.6. Модели и алгоритмы расчета процесса абсорбции	278
§ 6.7. Экстракция в системе жидкость — жидкость	302
§ 6.8. Сушка твердых сыпучих материалов	322
§ 6.9. Массовая кристаллизация из растворов	344
Литература	365
Приложения	367

Глава I

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КАК ОСНОВНОЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ОПТИМИЗАЦИИ И ПРОЕКТИРОВАНИЯ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

§ 1.1. Математическое моделирование

Процессы химической технологии — это сложные физико-химические системы, имеющие двойственную детерминированно-стохастическую природу, переменные в пространстве и во времени. 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.

Существенная особенность химико-технологических процессов состоит в том, что совокупность составляющих их явлений носит детерминированно-стохастическую природу, проявляющуюся в наложении стохастических особенностей гидродинамической обстановки в аппарате на процессы массо-, теплопереноса и химического превращения. Это объясняется случайным взаимодействием составляющих компонентов фаз (соударением частиц, их дроблением, коалесценцией, случайным блужданием по объему аппарата) или случайным характером геометрии граничных условий в аппарате (случайное расположение элементов беспорядочно уложенной насадки, зерен катализатора, производственная ориентация межфазной границы движущихся сред и т.п.).

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

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 мате-

математического описания и оценкой неизвестных параметров. Так, например, при рассмотрении явлений, возникающих в процессе движения ансамбля частиц, капель или пузырьков газа в сплошной жидкой среде, выделяют пять уровней иерархии эффектов: 1) совокупность явлений на атомарно-молекулярном уровне; 2) эффекты в масштабе надмолекулярных или глобулярных структур; 3) множество физико-химических явлений, связанных с движением единичного включения дисперсной фазы, с учетом химических реакций и явлений межфазного энерго- и массопереноса; 4) физико-химические процессы в ансамбле включений, перемещающихся в сплошной фазе; 5) совокупность процессов, определяющих макрогидродинамическую обстановку в масштабе аппарата. 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; 2) выбор метода решения системы уравнений математического описания и реализация его в форме моделирующей программы; 3) установление соответствия (адекватности) модели объекту.

На этапе составления математического описания предварительно выделяют основные явления и элементы в объекте и затем устанавливают связи между ними. Далее, для каждого выделенного элемента и явления записывают уравнение (или систему уравнений), отражающее его функционирование. Кроме того, в математическое описание включают уравнения связи между различными выделенными явлениями. В зависимости от процесса математическое описание может быть представлено в виде системы алгебраических, дифференциальных, интегральных и интегродифференциальных уравнений.

Этап выбора метода решения и разработки моделирующей программы подразумевает выбор наиболее эффективного метода решения из имеющихся (под эффективностью имеются в виду быстрота получения и точность решения) и реализацию его сначала в форме алгоритма решения, а затем — в форме программы, пригодной для расчета на ЭВМ.

Построения на основе физических представлений модель должна верно качественно и количественно описывать свойства моделируемого процесса, т.е. она должна быть адекватна моделируемому процессу. Для проверки адекватности математической модели реальному процессу нужно сравнить результаты измерений на объекте в ходе процесса с результатами предсказания модели в идентичных условиях.



Рис. 1.1. Этапы разработки математической модели

Этап установления адекватности модели является заключительным в последовательности этапов, выполняемых при ее разработке. На рис. 1.1 изображена общая схема разработки математической модели.

При построении математической модели реальное явление упрощается, схематизируется и полученная схема описывается в зависимости от сложности явлений с помощью того или иного математического аппарата.

От правильности учета в модели характерных черт рассматриваемого процесса зависят успех исследования и ценность полученных результатов моделирования.

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 и сделает исследование либо чрезмерно громоздким, либо вообще нереализуемым.

Метод математического моделирования применяют при изучении свойств процессов, для которых имеется достаточно точное математическое описание. В зависимости от степени полноты математического описания можно выделить два предельных случая: а) известны полная система уравнений, описывающая все основные стороны моделируемого процесса,

и все числовые значения параметров этих уравнений; б) полное математическое описание процесса отсутствует. Этот второй случай типичен для решения кибернетических задач, в которых приходится иметь дело с управлением процессами при наличии неполной информации об объекте и действующих на него возмущениях. При отсутствии достаточной информации об исследуемых явлениях их изучение начинается с построения простейших моделей, но без нарушения основной (качественной) специфики исследуемого процесса.

§ 1.2. Основные виды математических моделей

В зависимости от конкретной реализации процесса и его аппаратного оформления все многообразие химико-технологических процессов можно разделить на четыре класса исходя из временного и пространственного признаков: процессы, переменные во времени (нестационарные), и процессы, не меняющиеся во времени (стационарные); процессы, в ходе которых их параметры изменяются в пространстве, и процессы без пространственного изменения параметров. Так как математические модели являются отражением соответствующих объектов, то для них характерны те же классы, а именно: 1) модели, неизменные во времени, — *статические модели*; 2) модели, переменные во времени, — *динамические модели*; 3) модели, неизменные в пространстве, — *модели с сосредоточенными параметрами*; 4) модели, изменяющиеся в пространстве, — *модели с распределенными параметрами*. Рассмотрим перечисленные классы моделей.

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 аппарат с идеальным (полным) перемешиванием потока. Скорость мешалки такова, что концентрация во всех точках аппарата одинакова (рис. 1.2).

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

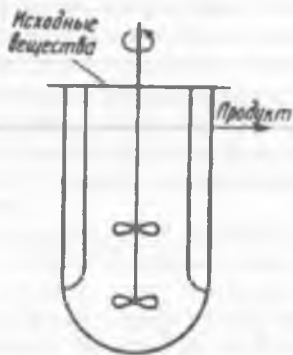


Рис. 1.2. Пример схемы аппарата, реализующего модель идеального смешения

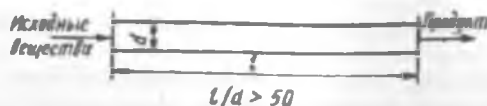


Рис. 1.3. Пример схемы аппарата, реализующего модель идеального вытеснения

уравнения в случае стационарных процессов с одной пространственной переменной. Примером процесса, описываемого такими моделями, служат трубчатый аппарат с большим отношением длины к диаметру и значительной скоростью движения реагентов (рис. 1.3).

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. Примером объекта, описываемого статической моделью, служит аппарат полного смешения объемом V в установившемся режиме работы, в который непрерывно подаются реагенты A и B в количестве v_A , v_B ($v_A + v_B = v$) и отводится продукт реакции P .

Математическое описание аппарата включает следующие уравнения материального баланса (для простоты тепловой баланс не рассматривается):

$$\begin{aligned} v(C_{A0} - C_A) &= V k C_A C_B, \\ v(C_{B0} - C_B) &= V k C_A C_B. \end{aligned} \quad (1.1)$$

Здесь k — константа скорости реакции.

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 (представление динамических моделей в виде передаточных функций особенно удобно для целей управления объектом). Примером динамической модели может служить модель рассмотренного выше аппарата полного смешения, но работающего в неустановившемся режиме. В этом случае математическое описание аппарата включает следующие уравнения материального баланса:

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{v}{V} (C_{A0} - C_A) - k C_A C_B, \quad (1.2)$$

$$\frac{dC_B}{dt} = \frac{v}{V} (C_{B0} - C_B) - k C_A C_B. \quad (1.3)$$

а также начальные условия

$$C_A = C_{A0}, \quad C_B = C_{B0} \quad \text{при } t = 0. \quad (1.4)$$

Математическая модель является системой уравнений математическо-

го описания, отражающей сущность протекающих в объекте явлений, для которой определен алгоритм решения, реализованный в форме моделирующей программы. Согласно этому определению математическая модель должна рассматриваться в совокупности трех ее аспектов: смыслового, аналитического и вычислительного.

Смысловой аспект представляет собой физическое описание природы моделируемого объекта.

Аналитический аспект является математическим описанием процесса в виде некоторой системы уравнений, отражающей протекающие в объекте явления и функциональные связи между ними.

Наконец, вычислительный аспект есть метод и алгоритм решения системы уравнений математического описания, реализованные как моделирующая программа на одном из языков программирования.

§ 1.3. Физическое описание природы объекта

Построение любой математической модели начинают с физического описания объекта моделирования. При этом выделяют "элементарные" процессы, протекающие в объекте моделирования, которые подлежат отражению в модели, и формулируют основные допущения, принимаемые при их описании. В свою очередь, перечень учитываемых "элементарных" процессов определяет совокупность явлений, описывающих объект, которые включают в математическую модель. В данном случае под "элементарным" процессом понимается физико-химический процесс, относящийся к определенному классу явлений, например массообмен, теплопередача и т.д. Здесь следует отметить, что название "элементарные" процессы отнюдь не означает, что данные процессы являются простейшими и описываются несложными уравнениями. Так, массообмен является предметом целой теории, до настоящего времени еще далекой до полного завершения. Это название означает лишь, что такие процессы являются составляющими много более сложного всего химико-технологического процесса.

Обычно при математическом моделировании объектов химической технологии принимаются во внимание следующие "элементарные" процессы: 1) движение потоков фаз; 2) массообмен между фазами; 3) теплопередача; 4) изменение агрегатного состояния (испарение, конденсация, растворение и т.д.); 5) химические превращения.

Полнота математического описания "элементарных" процессов в модели зависит от их роли во всем химико-технологическом процессе, степени изученности, глубины взаимосвязи "элементарных" процессов в объекте и желаемой точности всего описания. Взаимосвязь "элементарных" процессов может быть чрезвычайно сложной. Поэтому на практике часто делают различные допущения относительно характера связей, что позволяет избежать необходимости вводить в модель недостаточно изученных зависимостей и, следовательно, излишнего усложнения описания.

например, при физическом описании процесса ректификации смесей выделяют следующие "элементарные" процессы: 1) гидродинамика потоков жидкости и пара в колонне; 2) массообмен между жидкостью и паром; 3) теплопередача между жидкостью и паром; 4) испарение жидкости и конденсация пара. Все указанные "элементарные" процессы протекают либо на тарелке, либо в насадочной секции колонны и прямо связаны между собой. Полное описание этих процессов представляет собой чрезвычайно сложную систему уравнений. Только описание гидродинамики потока жидкости на тарелке (либо в насадке) с помощью уравнения Навье-Стокса представляет собой задачу чрезмерной вычислительной сложности. Не менее сложно и решение задачи полного описания массообмена между потоками жидкости и пара. Вместе с тем эти задачи должны решаться совместно как единая система уравнений. Отсюда следует, что без разумных упрощающих допущений здесь не обойтись. Поэтому обычно принимают идеализированное представление относительно движения потоков пара и жидкости (пар движется в режиме полного вытеснения, а жидкость полностью перемещается на тарелке), а массопередачу выражают через эффективность ступеней разделений, определяемую в большинстве случаев полуэмпирическими методами, либо вообще не рассматривают ее, считая, что на каждой ступени разделения достигается равновесие.

Следует отметить, что иногда физическое описание объекта моделирования устанавливается в результате математического моделирования. Так, математическое моделирование используется для проверки некоторых гипотез о механизме процессов, протекающих в объекте. Для этого в состав модели вводят исследуемые соотношения, чтобы по результатам последующего моделирования судить о справедливости того или иного физического предположения. Например, механизмы каталитических химических превращений в большинстве случаев неизвестны исследователям. Закладывая в математическую модель тот или иной механизм протекания химической реакции и сравнивая результаты моделирования с экспериментальными, можно отыскать наиболее близкий к истинному механизм.

§ 1.4. Составление математического описания объекта

При составлении математического описания общим приемом является блочный принцип. Согласно этому принципу, составлению математического описания предшествует анализ отдельных "элементарных" процессов, протекающих в объекте моделирования. При этом эксперименты по изучению каждого такого процесса проводят в условиях, максимально приближающихся к условиям эксплуатации объекта моделирования.

Сначала исследуют гидродинамическую модель процесса как основу структуры математического описания. Далее изучают кинетику химических реакций, процессов массо- и теплопередачи с учетом гидродинамических условий найденной модели и составляют математическое описание каждого из этих процессов. Заключительным этапом в данном случае является

объединение описаний всех исследованных "элементарных" процессов (блоков) в единую систему уравнений математического описания объекта моделирования. Достоинством блочного принципа построения математического описания является то, что его можно использовать на стадии проектирования объекта, когда окончательный вариант аппаратного оформления еще неизвестен.

Методы составления математического описания. К указанным методам относятся аналитический, экспериментальный и экспериментально-аналитический.

Аналитическими методами составления математического описания обычно называют способы вывода уравнений статистики и динамики на основе теоретического анализа физических и химических процессов, происходящих в исследуемом объекте, а также на основе заданных конструктивных параметров аппаратуры и характеристик перерабатываемых веществ. При выводе этих уравнений используются фундаментальные законы сохранения вещества и энергии, а также кинетические закономерности процессов переноса массы и теплоты, химических превращений.

Для составления математического описания с помощью аналитических методов не требуется проведения каких-либо экспериментов на объекте, поэтому такие методы пригодны для нахождения статических и динамических характеристик вновь проектируемых объектов, физико-химические процессы в которых достаточно хорошо изучены.

Параметры (коэффициенты) составленных уравнений функционально зависят от определяющих размеров химико-технологического аппарата (диаметра, длины и т.д.), свойств обрабатываемых веществ и величин, характеризующих протекание физико-химических процессов (констант скорости реакций, коэффициентов диффузии и др.). Некоторые параметры уравнений могут быть определены расчетным путем, другие находятся с помощью принципа подобия по результатам ранее выполненных исследований.

К недостаткам аналитических методов составления математического описания можно отнести сложность решения получающейся системы уравнений при достаточно полном описании объекта.

Экспериментальный метод составления математического описания используется для управления и исследования объектов в узком, "рабочем" диапазоне изменения входных и выходных переменных (например, при построении системы автоматической стабилизации отдельных технологических параметров). Эти методы чаще всего основываются на предположении о линейности и сосредоточенности параметров объекта. Принятие этих допущений позволяет сравнительно просто описывать наблюдаемые процессы алгебраическими или линейными дифференциальными уравнениями с постоянными коэффициентами. При экспериментальном подходе к составлению математического описания всегда требуется постановка опытов непосредственно на изучаемом объекте.

Достоинством экспериментальных методов является простота получаемого математического описания при достаточно точном описании

Например, при физическом описании процесса ректификации смесей выделяют следующие "элементарные" процессы: 1) гидродинамика потоков жидкости и пара в колонне; 2) массообмен между жидкостью и паром; 3) теплопередача между жидкостью и паром; 4) испарение жидкости и конденсация пара. Все указанные "элементарные" процессы протекают либо на тарелке, либо в насадочной секции колонны и прямо связаны между собой. Полное описание этих процессов представляет собой чрезвычайно сложную систему уравнений. Только описание гидродинамики потока жидкости на тарелке (либо в насадке) с помощью уравнения Навье-Стокса представляет собой задачу чрезмерной вычислительной сложности. Не менее сложно и решение задачи полного описания массообмена между потоками жидкости и пара. Вместе с тем эти задачи должны решаться совместно как единая система уравнений. Отсюда следует, что без разумных упрощающих допущений здесь не обойтись. Поэтому обычно принимают идеализированное представление относительно движения потоков пара и жидкости (пар движется в режиме полного вытеснения, а жидкость полностью перемещается на тарелке), а массопередачу выражают через эффективность ступеней разделений, определяемую в большинстве случаев полуэмпирическими методами, либо вообще не рассматривают ее, считая, что на каждой ступени разделения достигается равновесие.

Следует отметить, что иногда физическое описание объекта моделирования устанавливается в результате математического моделирования. Так, математическое моделирование используется для проверки некоторых гипотез о механизме процессов, протекающих в объекте. Для этого в состав модели вводят исследуемые соотношения, чтобы по результатам последующего моделирования судить о справедливости того или иного физического предположения. Например, механизмы каталитических химических превращений в большинстве случаев неизвестны исследователям. Закладывая в математическую модель тот или иной механизм протекания химической реакции и сравнивая результаты моделирования с экспериментальными, можно отыскать наиболее близкий к истинному механизм.

§ 1.4. Составление математического описания объекта

При составлении математического описания общим приемом является блочный принцип. Согласно этому принципу, составлению математического описания предшествует анализ отдельных "элементарных" процессов, протекающих в объекте моделирования. При этом эксперименты по изучению каждого такого процесса проводят в условиях, максимально приближающихся к условиям эксплуатации объекта моделирования.

Сначала исследуют гидродинамическую модель процесса как основу структуры математического описания. Далее изучают кинетику химических реакций, процессов массо- и теплопередачи с учетом гидродинамических условий найденной модели и составляют математическое описание каждого из этих процессов. Заключительным этапом в данном случае является

объединение описаний всех исследованных "элементарных" процессов (блоков) в единую систему уравнений математического описания объекта моделирования. Достоинством блочного принципа построения математического описания является то, что его можно использовать на стадии проектирования объекта, когда окончательный вариант аппаратного оформления еще неизвестен.

Методы составления математического описания. К указанным методам относятся аналитический, экспериментальный и экспериментально-аналитический.

Аналитическими методами составления математического описания обычно называют способы вывода уравнений статики и динамики на основе теоретического анализа физических и химических процессов, происходящих в исследуемом объекте, а также на основе заданных конструктивных параметров аппаратуры и характеристик перерабатываемых веществ. При выводе этих уравнений используются фундаментальные законы сохранения вещества и энергии, а также кинетические закономерности процессов переноса массы и теплоты, химических превращений.

Для составления математического описания с помощью аналитических методов не требуется проведения каких-либо экспериментов на объекте, поэтому такие методы пригодны для нахождения статических и динамических характеристик вновь проектируемых объектов, физико-химические процессы в которых достаточно хорошо изучены.

Параметры (коэффициенты) составленных уравнений функционально зависят от определяющих размеров химико-технологического аппарата (диаметра, длины и т.д.), свойств обрабатываемых веществ и величин, характеризующих протекание физико-химических процессов (констант скорости реакций, коэффициентов диффузии и др.). Некоторые параметры уравнений могут быть определены расчетным путем, другие находятся с помощью принципа подобия по результатам ранее выполненных исследований.

К недостаткам аналитических методов составления математического описания можно отнести сложность решения получающейся системы уравнений при достаточно полном описании объекта.

Экспериментальный метод составления математического описания используется для управления и исследования объектов в узком, "рабочем" диапазоне изменения входных и выходных переменных (например, при построении системы автоматической стабилизации отдельных технологических параметров). Эти методы чаще всего основываются на предположении о линейности и сосредоточенности параметров объекта. Принятие этих допущений позволяет сравнительно просто описывать наблюдаемые процессы алгебраическими или линейными дифференциальными уравнениями с постоянными коэффициентами. При экспериментальном подходе к составлению математического описания всегда требуется постановка опытов непосредственно на изучаемом объекте.

Достоинством экспериментальных методов является простота получаемого математического описания при достаточно точном описании

свойств объекта в узком диапазоне изменения параметров. Основной недостаток экспериментальных методов — невозможность установления функциональной связи между входящими в уравнения числовыми параметрами и конструктивными характеристиками объекта, режимными параметрами процесса, физико-химическими свойствами веществ. Кроме того, полученные экспериментальным методом математические описания нельзя распространять на другие однотипные объекты.

Наличие "сильных" и "слабых" сторон аналитического и экспериментального методов составления математического описания привело к необходимости разработки *комбинированного экспериментально-аналитического метода*. Сущность его заключается в аналитическом составлении уравнений описания, проведении экспериментальных исследований и нахождении по их результатам параметров уравнений. При подробном подходе к получению математического описания сохраняются многие положительные свойства экспериментальных и аналитических методов.

Состав математического описания. Формально математическое описание представляет собой совокупность зависимостей, связывающих различные переменные процесса в единую систему уравнений. Среди этих соотношений могут быть уравнения, отражающие общие физические законы (например, законы сохранения массы и энергии), уравнения, описывающие "элементарные" процессы (например, химические превращения), ограничения на переменные процесса и т.д. Кроме того, в состав математического описания входят также различные эмпирические и полумпирические зависимости между разными параметрами процесса, теоретическая форма которых неизвестна или слишком сложна.

В частности, при отсутствии или весьма ограниченном объеме теоретических сведений о моделируемом объекте, когда неизвестен даже ориентировочный вид соотношений, описывающих его свойства, уравнения математического описания могут представлять собой систему связывающих выходные и входные переменные эмпирических зависимостей, полученных в результате статистического обследования действующего объекта (экспериментальный метод составления математического описания). Эти модели обычно имеют вид регрессионных соотношений между входными и выходными переменными объекта и, разумеется, не отражают физическую сущность объекта моделирования, что затрудняет обобщение результатов, получаемых при их применении.

В отличие от моделей, основанных на регрессионных соотношениях, математические модели, построенные на основе аналитического метода составления описания, отражают основные закономерности процесса и качественно более правильно характеризуют его даже при наличии недостаточной точных параметров модели. Поэтому с их помощью можно изучать общие свойства объектов моделирования, относящихся к определенному классу.

В составе математического описания, разработанного на основе физической природы моделируемого объекта, можно выделять следующие группы уравнений:

1. *Уравнения сохранения массы и энергии, записанные с учетом гидродинамической структуры движения потоков.* Данная группа уравнений характеризует распределение в потоках температуры, концентраций и связанных с ним свойств. Обобщенное уравнение материального баланса имеет вид

$$\text{Приход вещества} - \text{Расход вещества} = \text{Накопление вещества.} \quad (1.5)$$

Разность между приходом и расходом вещества равна изменению его количества в рассматриваемом объекте. В стационарном режиме не может происходить ни убыль, ни накопление. В этом случае уравнение (1.5) переходит в уравнение материального баланса вида

$$\text{Приход вещества} = \text{Расход вещества.} \quad (1.6)$$

Уравнения (1.5), (1.6) применяются как к каждому веществу в отдельности, так и ко всей совокупности веществ, участвующих в процессе. Обобщенное уравнение теплового баланса имеет вид

$$\text{Приход теплоты} - \text{Расход теплоты} = \text{Накопление теплоты} \quad (1.7)$$

или для стационарных условий

$$\text{Приход теплоты} = \text{Расход теплоты.} \quad (1.8)$$

В условиях (1.7), (1.8) следует учесть работу, но поскольку во многих процессах энергетические эффекты являются тепловыми, при составлении уравнений сохранения энергии можно пользоваться указанными условиями.

2. *Уравнения элементарных процессов для локальных элементов потоков.* К этой группе относятся описания процессов массо- и теплообмена, химических реакций и др.

3. *Теоретические, полумпирические или эмпирические соотношения между различными параметрами процесса.* Таковы, например, зависимость коэффициента массопередачи от скоростей потоков фаз, зависимость теплоемкости смеси от состава и т.д.

4. *Ограничения на параметры процесса.* Например, при моделировании процесса ректификации многокомпонентных смесей на любой ступени разделения должно выполняться условие, что сумма концентраций всех компонентов равна 1. Кроме того, концентрация любого компонента должна находиться в диапазоне от 0 до 1.

Общим для всех математических моделей является то, что число уравнений, включаемых в математическое описание, должно быть равно числу переменных, находящихся в результате моделирования.

Рассмотрим кратко основные классы уравнений, встречающиеся в математических описаниях химико-технологических объектов. Для характеристики свойств разных объектов моделирования обычно применяют: алгебраические и трансцендентные уравнения, обыкновенные дифференциальные уравнения, дифференциальные уравнения в частных производных и интегральные уравнения. Последний тип — интегральные уравнения —

сравнительно редко встречается в задачах математического моделирования объектов химической технологии.

К алгебраическим уравнениям обычно сводится математическое описание стационарных режимов работы объектов с сосредоточенными параметрами (например, реактор полного смешения). Кроме того, уравнения этого типа применяют при описании более сложных объектов для выражения стационарных связей между разными параметрами. Математические описания в виде алгебраических уравнений наиболее просты, хотя сложность существенно зависит от числа уравнений и от вида входящих в них функций.

Обыкновенные дифференциальные уравнения обычно используют для математического описания нестационарных режимов объектов с сосредоточенными параметрами (например, для описания динамики реактора полного смешения), а также стационарных режимов объектов с распределенными параметрами по одной пространственной координате. В первом случае независимой переменной является время, а во втором — пространственная координата. Следует отметить общность и даже тождественность математических описаний, которая иногда свойственна математическим моделям различных объектов. Речь идет о нестационарных моделях периодически действующих аппаратов полного смешения и стационарных моделях аппаратов идеального вытеснения. В первом случае имеем (для реак-

ции $A + B \xrightarrow{k} P$):

$$\begin{aligned}\frac{dC_A}{dt} + kC_AC_B &= 0, \\ \frac{dC_B}{dt} + kC_AC_B &= 0, \\ C_A &= C_A^0, \quad C_B = C_B^0 \quad \text{при } t = 0,\end{aligned}\tag{1.9}$$

а во втором случае

$$\begin{aligned}v \frac{dC_A}{dx} + skC_AC_B &= 0, \\ v \frac{dC_B}{dx} + skC_AC_B &= 0, \\ C_A &= C_A^{0x}, \quad C_B = C_B^{0x} \quad \text{при } x = 0,\end{aligned}\tag{1.10}$$

где s — поперечное сечение реактора; v — объемный расход; $C_A^0, C_B^0, C_A^{0x}, C_B^{0x}$ — соответственно начальные и входные концентрации веществ A и B .

Как видно, системы уравнений (1.9), (1.10) совпадают с точностью до коэффициентов. Тождественность математического описания при этом позволяет сделать заключение о тождественности оптимальных решений, хотя практическая реализация оптимальных условий в обоих случаях может существенно различаться.

Сложность решения обыкновенных дифференциальных уравнений

определяется рядом обстоятельств. Во-первых, она возрастает с ростом порядка уравнения (или, что практически эквивалентно этому, с ростом числа дифференциальных уравнений в системе, поскольку уравнение m -го порядка всегда можно преобразовать в систему, состоящую из m уравнений первого порядка).

На сложность решения еще существенное влияние оказывает линейность или нелинейность уравнений. Линейные обыкновенные дифференциальные уравнения решаются гораздо проще; для них разработан ряд специальных методов, например операционное исчисление. Линейные дифференциальные уравнения с постоянными коэффициентами имеют простое аналитическое решение. Решение систем линейных дифференциальных уравнений — задача, к решению которой хорошо приспособлены аналоговые вычислительные машины.

Нелинейность резко усложняет решение, и, как правило, в этом случае требуется использование численных методов.

При решении систем дифференциальных уравнений часто приходится сталкиваться со свойством "жесткости" системы, заключающемся в значительном разбросе собственных значений матрицы системы, что не позволяет использовать обычные методы решения. В таких случаях необходимо применять специально разработанные алгоритмы.

Важной особенностью математического описания, содержащего обыкновенные дифференциальные уравнения, является необходимость задания начальных условий.

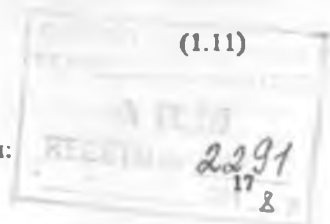
Дифференциальные уравнения в частных производных используют для математического описания динамики объектов с распределенными параметрами или стационарных режимов объектов с параметрами, распределенными по нескольким координатам. Для указанных уравнений при описании динамики объекта наряду с начальными условиями нужно также задавать граничные условия, в общем случае являющиеся функциями времени. Для стационарных режимов объектов, описываемых уравнениями в частных производных, задают только граничные условия. Задачи с уравнениями в частных производных, как правило, отличаются наибольшей сложностью, и в большинстве случаев решение каждой конкретной задачи требует серьезной работы.

Примером объекта, описываемого этим классом уравнений, является аппарат двувального вытеснения, работающий в нестационарных условиях, в котором протекает реакция $A + B \rightleftharpoons P$. В этом случае получаем систему уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_A}{\partial t} + v \frac{\partial C_A}{\partial x} + skC_A C_B &= 0, \\ \frac{\partial C_B}{\partial t} + v \frac{\partial C_B}{\partial x} + skC_A C_B &= 0 \end{aligned}$$

(1.11)

со следующими начальными и граничными условиями:



$$C_A = C_{A_n}(x), \quad C_B = C_{B_n}(x) \quad \text{при } t = 0, \quad (1.12)$$

$$C_A = C_{A_{гр}}(t), \quad C_B = C_{B_{гр}}(t) \quad \text{при } x = 0. \quad (1.13)$$

Здесь u — объемный расход; z — поперечное сечение.

Исследование объектов, описываемых дифференциальными уравнениями, иногда представляет собой весьма трудную вычислительную задачу. Поэтому в ряде случаев вместо математического описания объекта дифференциальными уравнениями используют его описание системой конечно-разностных уравнений, для чего непрерывный объект с распределенными параметрами рассматривают как дискретный с сосредоточенными параметрами, но имеющий ячеичную структуру. Формально математическая замена непрерывного объекта дискретным эквивалентна замене дифференциальных уравнений разностными соотношениями. При этом для объектов, описываемых обыкновенными дифференциальными уравнениями, математическое описание представляют в виде системы конечно-разностных уравнений. Для процессов, описываемых дифференциальными уравнениями в частных производных, результатом является система дифференциально-разностных уравнений, каждое из которых, в свою очередь, может быть представлено системой конечно-разностных уравнений. При подобных преобразованиях системы уравнений математического описания, естественно, возникает погрешность, которую необходимо учитывать при оценке результатов моделирования.

Вместе с тем существует ряд объектов, которые по своей природе обладают ячеичной структурой. Типичными примерами служат секционированные реакторы, тарельчатые колонны и т.д. Поэтому ячеичные модели являются не только удобной формой аппроксимации для объектов, описываемых дифференциальными уравнениями, но и имеют вполне определенное самостоятельное значение.

Общее математическое описание нестационарных объектов представляют в виде совокупности дифференциальных уравнений (обыкновенных или в частных производных), отражающих изменение переменных процесса во времени. Каждую переменную можно охарактеризовать временем релаксации t_i , в течение которого переменная изменяется на определенную долю от полного диапазона ее изменения при постоянных значениях остальных переменных. Пусть при этом все переменные объекта можно разделить на две группы, для одной из которых $t_i < t^I$, а для другой $t_i > t^I$, и, кроме того, справедливо соотношение $t^I < t^{II}$, означающее, что время релаксации переменных первой группы значительно меньше времени релаксации переменных второй группы. Тогда с некоторой степенью погрешности можно принять, что переменные первой группы, имеющие значительно меньшее время релаксации, безынерционны, и считать в уравнениях математического описания производные от указанных переменных по времени равными нулю. С помощью такого приема иногда удается весьма существенно упростить нестационарную математическую модель благодаря замене части дифференциальных уравнений конечными.

Математические модели, в которых нестационарные дифференциальные уравнения, описывающие изменения во времени переменных с малым временем релаксации, заменены стационарными уравнениями, можно назвать квазистационарными. Нестационарные модели, используемые на практике, фактически обычно являются квазистационарными, хотя при этом, строго говоря, необходимо обоснование квазистационарности ряда внутренних переменных.

С учетом сказанного математические модели можно классифицировать следующим образом:

по пространственным признакам — модели с сосредоточенными параметрами; ячеичные модели; модели с распределенными параметрами; по временным признакам — стационарные модели; квазистационарные модели; нестационарные модели.

§ 1.5. Выбор метода решения и реализации его в виде алгоритма решения и моделирующей программы

После составления математического описания и постановки в случае необходимости соответствующих начальных и граничных условий необходимо выбрать метод решения, разработать алгоритм и составить программу решения системы уравнений математического описания.

В простейших случаях, когда возможно аналитическое решение системы уравнений математического описания, необходимость специальной разработки моделирующего алгоритма и программы не возникает, так как вся информация получается из соответствующих аналитических решений. Когда же математическое описание представляет собой систему конечных и дифференциальных уравнений, от возможности построения эффективного алгоритма решения может существенно зависеть практическая применимость математической модели.

При выборе метода решения системы уравнений математического описания обычно руководствуются требованиями обеспечения максимальной скорости получения решения, надежной сходимостью алгоритма решения к истинному и минимальной памяти ЭВМ. При этом должна обеспечиваться заданная точность решения.

После выбора метода решения составляют последовательность вычислительных и логических действий, обеспечивающих решение, т.е. составляется алгоритм решения задачи. Основными требованиями к форме и содержанию записи алгоритма являются его наглядность, компактность и выразительность. В практике математического моделирования наибольшее распространение получили графический способ записи алгоритма (блок-схемы) и запись алгоритма в виде последовательности шагов.

Графический способ записи алгоритма основан на представлении отдельных элементов алгоритма графическими символами, а всего алгоритма — в виде блок-схемы. На блок-схемах внутри графических символов записывают словесно или символично производимые действия. Пред-

ставление алгоритма в виде блок-схемы обладает перед остальными способами тем преимуществом, что оно более наглядно. В то же время если алгоритм очень сложный или громоздкий, то графическое изображение может быть чересчур запутанным и не обладать наглядностью. В этих случаях применяют простую запись алгоритма в виде последовательности шагов. Степень детализации алгоритма зависит от его сложности, от математического обеспечения ЭВМ и от степени использования стандартных алгоритмов. Если, например, в программе применяется библиотечная подпрограмма, то ее, очевидно, нет необходимости детализировать, а достаточно лишь указать ее параметры.

В качестве примера рассмотрим алгоритм расчета аппарата идеального вытеснения, в котором протекает реакция $B + A \xrightarrow{k} P_A$. Математическое описание аппарата в стационарном режиме работы имеет следующий вид:

$$\frac{v}{x} \cdot \frac{dC_A}{dx} = -kC_A C_B, \quad (1.14)$$

$$\frac{v}{x} \cdot \frac{dC_B}{dx} = -kC_A C_B, \quad (1.15)$$

$$C_A = C_A^0, C_B = C_B^0 \text{ при } x = 0. \quad (1.16)$$

Будем считать, что реакция протекает в изотермических условиях. Тогда система обыкновенных дифференциальных уравнений (1.14), (1.15) может быть решена с помощью метода Эйлера. Для этого приводим ее к виду

$$\begin{aligned} \frac{dC_A}{dx} &= -\frac{x}{v} kC_A C_B = f_1(C_A, C_B), \\ \frac{dC_B}{dx} &= -\frac{x}{v} kC_A C_B = f_2(C_A, C_B). \end{aligned} \quad (1.17)$$

Согласно методу Эйлера, искомые концентрации C_A и C_B определяют по формулам

$$C_A = C_A^0 + \Delta x f_1(C_A, C_B), \quad (1.18)$$

$$C_B = C_B^0 + \Delta x f_2(C_A, C_B). \quad (1.19)$$

Графический алгоритм решения (блок-схема) системы уравнений (1.17) представлен на рис. 1.4.

Тот же алгоритм, выраженный в пошаговой форме, имеет следующий вид:

1. Задают $C_A^0, C_B^0, \Delta x, k, v, l$.
2. Находят $x = x + \Delta x$.
3. Проверяют условие на окончание интегрирования ($x > l$). Если оно выполнено, то выводят результаты и переходят к п. 7.
4. Рассчитывают правые части $f_1(C_A, C_B), f_2(C_A, C_B)$.
5. Определяют новые концентрации C_A и C_B .

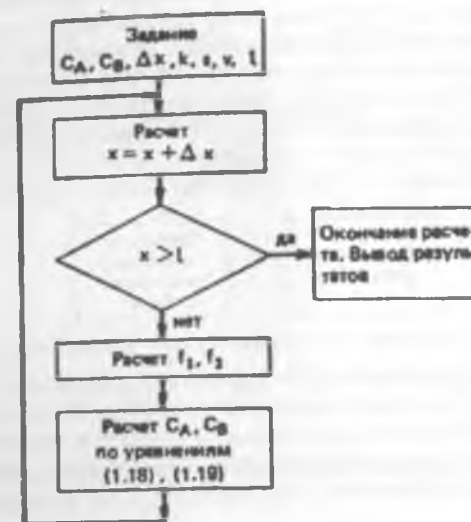


Рис. 1.4. Блок-схема алгоритма расчета реактора идеального вытеснения

6. Переходят к п. 2.

7. Оканчивают расчет.

Далее на основании алгоритма записывают программу на одном из языков высокого уровня. При записи программы необходимо стремиться к ее компактности, для чего широко используют процедуры и функции, поскольку в данном случае повторяющиеся вычислительные действия будут записаны в программе один раз. При составлении программы важно стремиться к минимизации требуемой памяти ЭВМ. Целесообразно записывать логически законченные части расчета в виде отдельных процедур (подпрограмм). В этом случае возможно их занесение в библиотеки и использование в различных расчетах. При составлении программы можно использовать стандартные подпрограммы, имеющиеся в библиотеках, так как это может значительно упростить работу по разработке программы. В особенности это относится к математическим методам, которые широко представлены в пакетах прикладных программ.

Этап программирования обычно завершается составлением описания программы, в котором указываются все переменные и соответствующие идентификаторы, входные и выходные переменные, порядок ввода и вывода информации.

§ 1.6. Блочный принцип построения математических моделей

При построении математических моделей широко используют блочный принцип, суть которого состоит в том, что модель строится из отдельных логически законченных блоков, отражающих обычно ту или иную сторону рассматриваемого процесса. Это может быть блок кинетики массо-

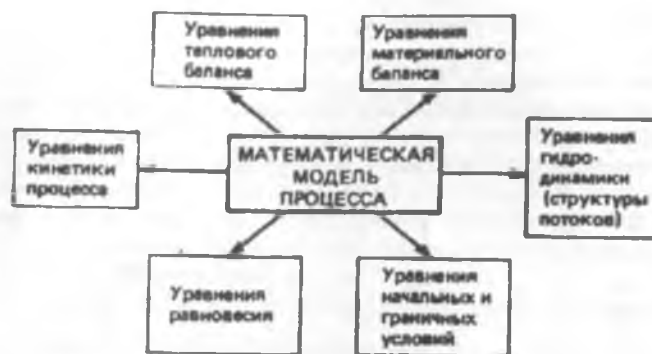


Рис. 1.5. Представление математического описания процесса

передачи, блок гидродинамики, блок фазового равновесия и т.п. Блочный принцип построения моделей позволяет: а) разбить общую задачу построения математической модели на отдельные подзадачи и тем самым упростить ее решение; б) использовать разработанные блоки в других моделях; в) модернизировать и заменять отдельные блоки на новые, не касаясь при этом остальных.

Представление математической модели процесса в виде совокупности подсистем (блоков) позволяет представить общее математическое описание как совокупность математических описаний отдельных блоков. Тогда общая структура математической модели может иметь вид, изображенный на рис. 1.5.

Применение блочного принципа построения математических моделей, который, в свою очередь, основан на системном подходе, позволяет во многих случаях также принципиально решить проблему масштабирования процессов. С точки зрения математического моделирования масштабный переход есть не что иное, как деформация математической модели при изменении геометрических размеров, характеризующих аппаратное оформление процесса. При использовании блочного принципа построения математической модели влияние геометрических размеров на свойства процесса отражается лишь в одной подсистеме (блоке) — блоке "гидродинамика". Поэтому при наличии достаточно корректного в качественном и количественном отношении математического описания этого блока 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 веществ. Однако получить такое фундаментальное

описание отдельных блоков при недостаточной исследованности отдельных явлений во многих случаях в настоящее время не представляется возможным. Это связано, как правило, с чрезвычайным усложнением математического описания блока, что само по себе приводит к резкому усложнению математической модели процесса в целом и, кроме того, может вызвать определенные вычислительные трудности. Поэтому при практическом использовании блочного принципа в математическом описании каждого блока на том или ином уровне его детализации приходится применять эмпирические соотношения.

Глава II

ИДЕНТИФИКАЦИЯ ПАРАМЕТРОВ И УСТАНОВЛЕНИЕ АДЕКВАТНОСТИ МОДЕЛЕЙ

Идентификация математического описания объекта является основным этапом в построении адекватной математической модели процесса и поэтому представляет собой одну из центральных задач математического моделирования химико-технологических процессов. Как уже отмечалось, большинство таких процессов представляет собой многофазную многокомпонентную среду, распределенную в пространстве и во времени. Существенной особенностью этих процессов является их детерминированно-стохастическая природа, определяемая наложением стохастических особенностей гидродинамической обстановки в аппарате на процессы массо- и теплопереноса. Как следствие этого, параметры математических моделей отражают стохастические особенности протекания процесса и определяются статистическими методами.

В настоящее время наиболее разработана теория оценивания линейных по параметрам математических моделей. Однако большинство моделей химико-технологических процессов нелинейны по параметрам, что создает значительные трудности при решении задач их идентификации. Поэтому часто идентификацию нелинейных моделей проводят либо с помощью приближенных оценок, либо путем линеаризации исходной модели химико-технологического процесса. В настоящей главе будут рассмотрены методы идентификации как линейных, так и нелинейных математических моделей.

Так как наряду с оценкой неизвестных параметров задача идентификации подразумевает сравнение рассчитываемых по модели переменных состояния химико-технологического процесса с наблюдаемыми (экспериментальными) значениями, то в данной главе рассматриваются и методы установления соответствия (адекватности) модели реальному объекту.

§ 2.1. Статистическое оценивание числовых характеристик случайных процессов

Рассмотрим следующую общую постановку задачи. Пусть в некотором случайном эксперименте наблюдается случайная величина X , функция распределения которой зависит от параметра θ . Значение параметра неизвестно и нуждается в определении. Для этого получают случайную выборку некоторого объема наблюдений над величиной $(x_1, x_2, \dots, x_n)$, являющуюся источником информации относительно неизвестного параметра θ .

Последовательность наблюдений $(x_1, x_2, \dots, x_n)$ можно представить как n независимых случайных величин с одинаковой функцией плотности распределения $f(x, \theta)$. Тогда выборка $(x_1, x_2, \dots, x_n)$ является случайной для n -мерной случайной величины с функцией плотности распределения

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n; \theta) = f(x_1; \theta)f(x_2; \theta) \dots f(x_n; \theta), \quad (2.1)$$

называемой *функцией правдоподобия*.

Статистикой (выборочной характеристикой) называют функцию, зависящую только от результатов наблюдения $x_1, x_2, \dots, x_n$:

$$Q = \psi(x_1, x_2, \dots, x_n). \quad (2.2)$$

Отсюда следует, что статистика представляет собой случайную величину с законом распределения, определяемым функцией правдоподобия, а следовательно, и законом распределения случайной величины.

Законы распределения выборочных характеристик. Прежде чем перейти к рассмотрению законов распределения выборочных характеристик, введем важное вспомогательное понятие.

Характеристической функцией $m_X(t)$ случайной величины X называют математическое ожидание случайной функции e^{itx} от аргумента t , т.е.

$$m_X(t) = M e^{itx}, \quad (2.3)$$

где t — произвольное действительное число.

Согласно определению характеристическая функция непрерывной случайной величины X с плотностью вероятности $f(x)$ есть

$$m_X(t) = \int_a^b e^{itx} f(x) dx, \quad (2.4)$$

где (a, b) — интервал изменения случайной величины X .

Рассмотрим теперь точные распределения выборочных характеристик, т.е. законы распределения статистики Q , справедливые при любом n . Предположим, что имеется выборка объемом n из одномерной генеральной совокупности с функцией распределения $F(x)$, и требуется определить закон распределения статистики $Q(x_1, x_2, \dots, x_n)$. Эта задача сводится к отысканию закона распределения функции $Q(x_1, x_2, \dots, x_n)$ от n независимых случайных величин $X_1, X_2, \dots, X_n$ с одной и той же функцией распределения $F(x)$.

Теоретически доказано, что если заданы функции F и Q , то всегда существует единственное решение.

Однако при современном состоянии математической статистики приемом точное решение удается получить лишь в сравнительно редких случаях. Лишь в частном случае, когда выборка берется из нормальной генеральной совокупности, получены достаточно полные результаты. Именно этот случай мы и будем рассматривать в дальнейшем.

Если $X_1, X_2, \dots, X_n$ — независимые, нормированные нормально распределенные случайные величины $N(0, 1)$, т.е. $MX_l = 0$ и $DX_l = 1$ для $l = 1, 2, \dots, k$, то случайная величина

$$U^2 = \sum_{l=1}^k X_l^2 \quad (2.5)$$

имеет распределение χ^2 с k степенями свободы, где k — единственный параметр распределения χ^2 , характеризующий число независимых слагаемых в выражении (2.5).

Плотность вероятностей распределения χ^2 имеет вид

$$f(u^2) = \frac{1}{2^{k/2} \Gamma(\frac{k}{2})} (u^2)^{k/2-1} e^{-\frac{u^2}{2}}, \quad (2.6)$$

где $\Gamma(\frac{k}{2})$ — гамма-функция, определяемая равенством

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty e^{-t} t^{z-1} dt \quad \text{для } z > 0. \quad (2.7)$$

Отметим, что математическое ожидание случайной величины U^2 равно числу степеней свободы k , а дисперсия — удвоенному числу степеней свободы, т.е.

$$MU^2 = k, \quad DU^2 = 2k. \quad (2.8)$$

Рассмотрим статистики, имеющие χ^2 -распределение. С данным законом распределения тесно связано распределение выборочной дисперсии $S^2 = S^2(x_1, x_2, \dots, x_n)$.

Если математическое ожидание нормально распределенной генеральной совокупности известно ($MX = \mu$), то выборочная дисперсия S^2 определяется выражением

$$S^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2. \quad (2.9)$$

Тогда статистика

$$\chi^2 = \frac{nS^2}{\sigma^2} \quad (2.10)$$

будет иметь χ^2 -распределение с n степенями свободы. Действительно, подставив (2.9) в (2.10), получим

имеет распределение Фишера с $n_1 - 1$ и $n_2 - 1$ степенями свободы, где $\hat{S}_1^2 > \hat{S}_2^2$.

Согласно (2.13) выборочные характеристики $\chi_1^2 = \frac{(n_1-1)\hat{S}_1^2}{\sigma^2}$ и $\chi_2^2 = \frac{(n_2-1)\hat{S}_2^2}{\sigma^2}$ имеют распределение χ^2 соответственно с $n_1 - 1$ и $n_2 - 1$ степенями свободы. По условию выборки χ_1^2 и χ_2^2 независимы. Тогда согласно определению F -распределения статистика

$$F = \frac{\chi_1^2}{\chi_2^2} \cdot \frac{n_2 - 1}{n_1 - 1} = \frac{\hat{S}_1^2}{\hat{S}_2^2} \quad (2.21)$$

имеет F -распределение с числом степеней свободы $n_1 - 1$ и $n_2 - 1$.

Виды статистических оценок параметров. Предположим, что из генеральной совокупности X с законом распределения $F(x, \theta)$, функциональная форма которого известна, взята выборка $x_1, x_2, \dots, x_n$, по результатам которой требуется оценить неизвестный параметр распределения θ (для простоты — единственный). Всегда существует бесконечное число функций от результатов наблюдений θ_n^* ($x_1, x_2, \dots, x_n$), которые можно предложить в качестве оценки параметра θ . Возникает вопрос: какими свойствами должна обладать функция θ_n^* , чтобы ее считать хорошей оценкой? Рассматривая $x_1, x_2, \dots, x_n$ как наблюдавшиеся значения системы одинаково распределенных независимых случайных величин $x_1, x_2, \dots, x_n$ с законом распределения $F(x, \theta)$ каждая, мы имеем случайную величину θ_n^* ($x_1, x_2, \dots, x_n$), закон распределения которой зависит от параметра θ . Поэтому в качестве оценки следует рассматривать не отдельные ее значения, а распределение ее значений в большой серии испытаний, т.е. закон распределения оценки. Чтобы значение θ_n^* ($x_1, x_2, \dots, x_n$) было близко к θ , необходимо, очевидно, потребовать, чтобы рассеивание случайной величины θ_n^* относительно θ было по возможности меньшим. Таким образом, наилучшая оценка должна обладать наименьшей возможной дисперсией. Это основное требование к оценке.

Теория статистического оценивания рассматривает два основных вида оценок: точечные и интервальные.

Точечной оценкой называют некоторую функцию результатов наблюдения θ_n^* ($x_1, x_2, \dots, x_n$), значение которой в данных условиях принимается за наибольшее приближение к значению параметра θ генеральной совокупности.

Однако при выборке небольшого объема точечная оценка θ_n^* может существенно отличаться от истинного значения параметра, т.е. приводить к грубым ошибкам. Поэтому в случае малой выборки часто используют интервальные оценки.

Интервальной оценкой называют числовой интервал (θ_1^*, θ_2^*) , определяемый по результатам выборки, относительно которого можно утверждать с определенной, близкой к единице, вероятностью, что он содержит значение оцениваемого параметра генеральной совокупности.

Рассмотрим сначала точечные оценки. Из точечных оценок наиболее часто используют начальные моменты

$$M_\beta = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i^\beta \quad (2.22)$$

и центральные моменты

$$\mu_\beta = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^\beta, \quad (2.23)$$

где $\beta = 1, 2, 3, 4, \dots$ — порядок момента.

Основная проблема теории точечных оценок заключается в выборе возможно лучшей оценки, отвечающей требованиям несмещенности, эффективности и состоятельности.

Точечную оценку θ_n^* называют *несмещенной*, если ее математическое ожидание равно оцениваемому параметру θ :

$$M\theta_n^* = \theta. \quad (2.24)$$

Соответственно *смещением* B_n оценки θ_n^* называют разность

$$B_n = M \theta_n^* - \theta. \quad (2.25)$$

Точечная оценка θ_n^* параметра θ называется *состоятельной*, если при $n \rightarrow \infty$ оценка θ_n^* сходится по вероятности к оцениваемому параметру, т.е. выполняется условие

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P\{|\theta_n^* - \theta| < \epsilon\} = 1 \text{ для любого } \epsilon > 0. \quad (2.26)$$

На практике состоятельность оценки обычно определяют по следующим условиям:

- 1) смещение оценки равно нулю $B_n = 0$ или стремится к нулю при $n \rightarrow \infty$;
- 2) дисперсия оценки $D\theta_n^*$ удовлетворяет равенству $\lim_{n \rightarrow \infty} D\theta_n^* = 0$.

Дисперсия выборочной оценки связана с еще одним ее важным свойством — эффективностью. Требование эффективности оценки основано на логическом правиле, заключающемся в том, что если имеется несколько несмещенных оценок параметра, то следует отдать предпочтение оценке с наименьшей дисперсией $D(\theta_n^*)$, так как в этом случае риск получения существенной ошибки оценивания будет наименьшим.

Однако задача отыскания эффективной оценки очень трудоемкая и далеко не всегда разрешима. Поэтому на практике чаще используют понятие относительной эффективности. Пусть θ_1^* и θ_2^* — несмещенные оценки параметра θ ; тогда *относительная эффективность* оценок определяется отношением

$$I = \frac{D(\theta_2^*)}{D(\theta_1^*)}. \quad (2.27)$$

Если $I > 1$, то оценка θ_2^* более эффективна, чем θ_1^* .

Эффективные оценки являются наилучшими оценками параметра θ в смысле минимума дисперсии. Однако получение таких оценок не всегда возможно. Более широкий класс оценок, чем эффективные, составляют достаточные оценки. Достаточность связана с объемом информации, содержащимся в выборке и необходимым для принятия решения относительно параметра θ генеральной совокупности. Оценка θ_n^* параметра θ называется *достаточной*, если условное распределение $p(x_1, x_2, \dots, x_n | \theta_n^* = d)$ (где d — конкретное значение статистики θ_n^*) не зависит от неизвестного параметра θ для всех возможных значений θ_n^* .

На практике достаточность статистики обычно проверяют с помощью критерия факторизации. Согласно этому критерию оценка является достаточной тогда и только тогда, когда функция правдоподобия $L(x_1, x_2, \dots, x_n | \theta)$ может быть представлена в виде произведения двух множителей, первый из которых зависит от параметра θ и статистики θ_n^* , а второй зависит только от результатов наблюдений $x_1, x_2, \dots, x_n$ и не зависит от θ , т.е.

$$L(x_1, x_2, \dots, x_n | \theta) = G(\theta, \theta_n^*) H_1(x_1, x_2, \dots, x_n). \quad (2.28)$$

Рассмотрим теперь интервальные оценки. Все рассмотренные выше оценки были точечными, так как оценивали неизвестный параметр генеральной совокупности с помощью соответствующей статистики.

Однако точечная оценка без указания степени точности и надежности мало информативна, так как наблюдаемые значения статистики являются лишь частными значениями случайной величины. В особенности это касается выборки малого объема, когда точечная оценка может существенно отличаться от оцениваемого параметра, что приводит к грубым ошибкам.

Чтобы получить представление о точности и надежности оценки θ^* параметра θ , для каждой близкой к единице вероятности γ можно указать такое Δ , что

$$P(|\theta^* - \theta| < \Delta) = P(-\Delta < \theta^* - \theta < \Delta) = P(\theta^* - \Delta < \theta < \theta^* + \Delta) = \gamma. \quad (2.29)$$

Оценка θ^* тем точнее, чем меньше для заданного γ окажется Δ . Из соотношения (2.29) следует, что вероятность того, что доверительный интервал $(\theta^* - \Delta; \theta^* + \Delta)$ со случайными границами накроет известный параметр θ , равна γ . Величину Δ , равную половине ширины доверительного интервала, называют *точностью оценки*, а вероятность γ — *доверительной вероятностью* (или *надежностью*) оценки.

Рассмотрим построение доверительного интервала. Пусть из генеральной совокупности X с нормальным законом распределения $N(\mu, \sigma)$ и неизвестным среднеквадратическим отклонением σ взята случайная выборка $x_1, x_2, \dots, x_n$ объемом n и вычислено среднее значение $\bar{x}$. Требуется найти интервальную оценку для μ , используя статистику $\bar{x}$.

Для построения интервальной оценки параметра μ будем использовать статистику

$$T = \frac{\bar{x} - \mu}{s} \sqrt{n-1}. \quad (2.30)$$

Ранее мы показали, что данная статистика имеет распределение Стьюдента с $n-1$ степенями свободы.

Предположим, что среднее арифметическое значение $\bar{x}$ и выборочное среднеквадратическое отклонение S определены по результатам выборки объемом n из генеральной совокупности X . Тогда по таблицам t -распределения для $n-1$ степеней свободы находим значение t_γ , для которого справедливо равенство

$$P\left\{-t_\gamma < \frac{\bar{x} - \mu}{S} \sqrt{n-1} < t_\gamma\right\} = \gamma. \quad (2.31)$$

После преобразования неравенств получим соотношение для доверительного интервала параметра μ , найденное с помощью распределения Стьюдента:

$$P\left\{\bar{x} - t_\gamma \frac{S}{\sqrt{n-1}} < \mu < \bar{x} + t_\gamma \frac{S}{\sqrt{n-1}}\right\} = \gamma, \quad (2.32)$$

где точность оценки определяется равенством

$$\Delta = t_\gamma \frac{S}{\sqrt{n-1}}, \quad (2.33)$$

§ 2.2. Параметрическая идентификация моделей

Применение методов наименьших квадратов и максимального правдоподобия для нахождения точечных оценок параметров. Построенные с помощью экспериментального либо экспериментально-аналитического метода математические модели содержат неизвестные константы (параметры), значения которых определяются по экспериментальным данным. Если используемые модели линейны относительно искомых параметров, то задача их оценки сравнительно легко решается методами линейного регрессионного анализа и, в частности, *методом наименьших квадратов*.

Оценка неизвестных параметров в методе наименьших квадратов производится с помощью минимизации суммы квадратов расхождений. Такой подход во многих важных ситуациях приводит к оценкам, обладающим важными свойствами оптимальности.

Представим наблюдаемые значения y_i в виде

$$y_i = \sum_{j=1}^p \lambda_j \theta_j + \epsilon_i, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (2.34)$$

где $\theta_1, \dots, \theta_p$ — параметры, подлежащие оценке; λ_j — известные коэффициенты; $(y_1, \dots, y_n)$ — результаты наблюдений; $(\epsilon_1, \dots, \epsilon_n)$ — случайные ошибки наблюдений, относительно которых предполагается, что

$$M\{\epsilon_i\} = 0, \quad M\{\epsilon_{i'} \epsilon_{i''}\} = \begin{cases} 0, & 1 \leq i' < i'' \leq n, \\ \sigma^2, & i' = i'', \end{cases} \quad (2.35)$$

т.е. ошибки наблюдений имеют одинаковые дисперсии, нулевые математические ожидания и независимы.

Схему наблюдений (2.34) называют *линейной моделью*. Эту модель удобно записать в матричной форме. Пусть $\vec{y}$ — вектор-столбец наблюдений; Λ — прямоугольная ($n \times p$)-матрица коэффициентов; $\vec{\theta}$ — вектор-столбец параметров; $\vec{\epsilon}$ — вектор-столбец ошибок, т.е.

$$\vec{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}, \Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_{11} & \lambda_{12} & \dots & \lambda_{1p} \\ \lambda_{21} & \lambda_{22} & \dots & \lambda_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \lambda_{n1} & \lambda_{n2} & \dots & \lambda_{np} \end{pmatrix}, \vec{\theta} = \begin{pmatrix} \theta_1 \\ \theta_2 \\ \vdots \\ \theta_p \end{pmatrix}, \vec{\epsilon} = \begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \vdots \\ \epsilon_n \end{pmatrix}. \quad (2.36)$$

Тогда матричная форма условия (2.34) равносильна соотношению

$$\vec{y} = \Lambda \vec{\theta} + \vec{\epsilon}, \quad (2.37)$$

а условий (2.35) — соотношением

$$M\{\vec{\epsilon}\} = 0, V(\vec{\epsilon}) = M\{\vec{\epsilon}^T \vec{\epsilon}\} = \sigma^2 I, \quad (2.38)$$

где $V(\vec{\epsilon})$ — ковариационная матрица ошибок наблюдений; I — единичная ($n \times n$) матрица; ^{T} — символ транспонирования.

В данном случае применение метода наименьших квадратов состоит в минимизации суммы квадратов

$$Q = \sum_{i=1}^n (y_i - \sum_{j=1}^p \lambda_{ij} \theta_j)^2. \quad (2.39)$$

Необходимые условия существования минимума Q имеют вид

$$\frac{\partial Q}{\partial \theta_j} = 0 \quad (j = 1, 2, \dots, p), \quad (2.40)$$

или

$$\frac{\partial Q}{\partial \theta_j} = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - \sum_{j=1}^p \lambda_{ij} \theta_j) \lambda_{ij} = 0. \quad (2.41)$$

Условие (2.41) записывается в виде системы линейных уравнений относительно параметров θ_j :

$$\sum_{k=1}^p L_{jk} \theta_k = \sum_{i=1}^n y_i \lambda_{ij}, \quad (j = 1, 2, \dots, p), \quad (2.42)$$

где

$$L_{jk} = \sum_{i=1}^n \lambda_{ij} \lambda_{ik} \quad (j, k = 1, 2, \dots, p). \quad (2.43)$$

Предполагая, что эта система невырождена, т.е. ее определитель

$$\Delta = \begin{bmatrix} L_{11} & L_{12} & \dots & L_{1p} \\ L_{21} & L_{22} & \dots & L_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ L_{p1} & L_{p2} & \dots & L_{pp} \end{bmatrix} \neq 0, \quad (2.44)$$

найдем ее единственное решение $\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2, \dots, \hat{\theta}_r$. Эти величины называются оценками по методу наименьших квадратов. Их удобно искать в матричной форме. Используя обозначения (2.36), перепишем (2.39) следующим образом:

$$Q = (\vec{y} - \Lambda \vec{\theta})^T (\vec{y} - \Lambda \vec{\theta}). \quad (2.45)$$

При этом система (2.42) примет вид

$$\Lambda^T \vec{y} - \Lambda^T \Lambda \vec{\theta} = 0. \quad (2.46)$$

Предполагая, что матрица $\Lambda^T \Lambda$ — невырожденная, а это условие равносильно условию $\Delta \neq 0$, из (2.46) найдем вектор-столбец искомых оценок $\vec{\theta}$:

$$\hat{\vec{\theta}} = (\Lambda^T \Lambda)^{-1} \Lambda^T \vec{y}. \quad (2.47)$$

Однако подавляющее большинство моделей нелинейны по параметрам, что значительно усложняет методы их оценки. Рассмотрим процедуру идентификации таких моделей более подробно. Пусть имеется m моделей механизма протекания процесса в аппарате, которые могут быть представлены в виде

$$\vec{\eta}_u^{(j)}(\vec{\theta}_j) = f^{(j)}(\vec{x}_u, \vec{\theta}_j), \quad \vec{y}_u = \vec{\eta}_u^{(j)}(\vec{\theta}_j) + \vec{\epsilon}_u, \quad (2.48)$$

$$M \vec{\epsilon}_u = 0, \quad D \vec{\epsilon}_u = \sigma^2 V \quad (2.49)$$

или

$$\frac{d \vec{\eta}_u^{(j)}}{dt} = \vec{\varphi}^{(j)}(\vec{\eta}_u^{(j)}, \vec{x}_u, (\vec{\theta}_j, \vec{y}_u)) = \vec{\eta}_u^{(j)}(\vec{\theta}_j) + \vec{\epsilon}_u, \quad (2.50)$$

$$M \vec{\epsilon}_u = 0, \quad D \vec{\epsilon}_u = \sigma^2 V, \quad (2.51)$$

где $\vec{\theta}_j$ — p_j -мерный вектор неизвестных параметров для j -й модели; $\vec{x}_u$ — q -мерный вектор управляемых переменных; $\vec{\epsilon}_u$ — вектор ошибок воспроизводимости наблюдений; u — номер опыта; M — символ математического ожидания; D — дисперсионно-ковариационная матрица измерений; σ^2, V — скалярный множитель и положительно определенная матрица, характеризующие D ; $\vec{y}_u$ — Q -мерный вектор измерений; $\vec{\eta}_u^{(j)}(\vec{\theta}_j)$ — Q -мерный вектор отклика системы.

Между случайными величинами обычно существует такая связь, при которой с изменением одной величины меняется распределение другой. Такая связь называется *стохастической*.

Если две случайные величины X и Y независимы, то дисперсия суммы этих величин равна сумме дисперсий:

$$D(X + Y) = D(X) + D(Y). \quad (2.52)$$

Если же данное равенство не выполняется, то величины X и Y являются зависимыми. Из определения дисперсии и свойств математического ожидания следует

$$D\{X + Y\} = M[X + Y - M(X + Y)]^2 = M[X - M(X)]^2 + 2M\{[X - M(X)][Y - M(Y)]\} + M[Y - M(Y)]^2 = \quad (2.53)$$

Между X и Y существует зависимость, если

$$M[(X - m_x)(Y - m_y)] \neq 0. \quad (2.54)$$

Последняя величина называется *ковариацией* случайных величин X и Y и обозначается cov_{xy} .

Пусть β — вектор-столбец математических ожиданий случайных величин, а B — вектор выборочных значений случайных величин. Тогда

$$M[(B - \beta)(B - \beta)^T] = \begin{bmatrix} \sigma_{b_1}^2 & \text{cov}_{b_1 b_2} & \dots & \text{cov}_{b_1 b_n} \\ \text{cov}_{b_2 b_1} & \sigma_{b_2}^2 & \dots & \text{cov}_{b_2 b_n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \text{cov}_{b_n b_1} & \text{cov}_{b_n b_2} & \dots & \sigma_{b_n}^2 \end{bmatrix} \quad (2.55)$$

где $\sigma_{b_j}^2$ — дисперсия случайной величины b_j ; $\text{cov}_{b_j b_n}$ — ковариация случайных величин b_j и b_n .

Матрица в правой части последнего уравнения называется *дисперсионно-ковариационной матрицей*. Ее диагональные элементы представляют собой дисперсии случайных величин, а недиагональные — ковариации соответствующих случайных величин, определяющие статистическую зависимость между ними.

Рассмотрим сначала *однооткликовые модели*, т.е. модели с одной выходной переменной. При оценке неизвестных параметров моделей очень часто используется *метод максимального правдоподобия*, предложенный Р. Фишером и являющийся основой многих процедур проверки гипотез и доверительного интервального оценивания для больших выборок.

Пусть имеется непрерывная случайная величина, закон распределения которой задан плотностью вероятности $f(x, \theta)$. Составим функцию правдоподобия:

$$f_{\Pi}(x_1, x_2, \dots, x_n; \theta) = f(x_1; \theta)f(x_2; \theta) \dots f(x_n; \theta), \quad (2.56)$$

где $x_1, \dots, x_n$ — фиксированные значения случайной величины, а θ — вектор параметров.

Суть метода максимального правдоподобия состоит в том, что в качестве оценок параметров $\theta_{\Pi} = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_p)$ берут такие значения $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_p$, при которых f_{Π} достигает наибольшего возможного значения. Так как $\ln f_{\Pi}$ достигает максимума при тех же значениях θ , что и сама f_{Π} , то на практике часто удобнее использовать функцию $\ln f_{\Pi} = L$, которую можно называть *логарифмической функцией правдоподобия*. Значения $\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2, \dots, \hat{\theta}_p$ являются функциями выборки $x_1, x_2, \dots, x_n$ и называются *оценками максимального правдоподобия*.

Для нахождения оценок максимального правдоподобия следует решить относительно $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_p$ систему уравнений правдоподобия

$$\frac{\partial L}{\partial \theta_1} = 0, \dots, \frac{\partial L}{\partial \theta_p} = 0. \quad (2.57)$$

Если семейство распределений ошибок воспроизводимости ϵ_n отвечает условиям регулярности, то оценки максимального правдоподобия в большинстве случаев являются состоятельными в том смысле, что оценка

параметров по вероятности стремится к истинному значению, когда объем опытов неограниченно растет. Условия регулярности и состоятельности обеспечивают асимптотическую эффективность оценок параметров. Кроме того, если распределение ошибок измерений принадлежит Q -параметрическому экспоненциальному типу, то оценка вектора неизвестных параметров $\vec{\theta}_j$ является достаточной, т.е. содержит всю необходимую информацию, имеющуюся в исходных экспериментальных данных. Итак, оценки искоемых параметров, найденные методом максимального правдоподобия, при достаточно слабых ограничениях на функцию распределения ошибок ϵ_u и при больших выборках обладают многими важными оптимальными свойствами.

При практическом использовании метода максимального правдоподобия обычно предполагается известным вид плотности распределения ошибок наблюдений, причем наряду с неизвестными параметрами моделей могут быть оценены и неизвестные параметры плотности распределения.

Предположим, что для модели M_j некоторым способом получены оценки параметров $\vec{\theta}_j$. Тогда в соответствии с уравнением (2.48) j -я модель может быть записана в виде

$$e_u^{(j)} = y_u^{(j)} - f^{(j)}(\vec{x}_u, \vec{\theta}_j^*) \quad (u = 1, \dots, n), \quad (2.58)$$

где $e_u^{(j)}$ — оценки ошибки эксперимента ϵ_u для заданных $\vec{\theta}_j$ и M_j ; n — число наблюдений.

Пусть поставлены n опытов. Обозначим через $p(\epsilon_u, \vec{\psi})$ плотность распределения случайной величины ϵ_u , а через $p(\vec{\epsilon}, \vec{\psi})$ — совместную плотность распределения случайного вектора $\vec{\epsilon} = (\epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_n)^T$, где $\vec{\psi}$ — вектор параметров плотности распределения, содержащий, в частности, для нормальной плотности величины математического ожидания и дисперсии воспроизводимости.

Тогда функция правдоподобия выборки $L^{(j)}(\vec{\theta}_j^*, \vec{\psi})$, полученная в результате подстановки величины $e_u^{(j)}$ из соотношения (2.58) в выражение $p(\vec{\epsilon}, \vec{\psi})$, имеет вид

$$L^{(j)}(\vec{\theta}_j^*, \vec{\psi}) = p(e^{(j)}(\vec{\theta}_j^*, \vec{\psi})). \quad (2.59)$$

Для независимых случайных величин ϵ_u ($u = 1, 2, \dots, n$) функция правдоподобия выборки определяется так:

$$L^{(j)}(\vec{\theta}_j^*, \vec{\psi}) = \prod_{u=1}^n p(e^{(j)}(\vec{\theta}_j^*), \vec{\psi}). \quad (2.60)$$

Таким образом, функция правдоподобия выборки ошибок наблюдений $L^{(j)}(\vec{\theta}_j^*, \vec{\psi})$ для параметров $\vec{\theta}_j$ и $\vec{\psi}$ и для совокупности наблюдений $y_1, y_2, \dots, y_n$ является плотностью распределения выборки $p(e^{(j)}(\vec{\theta}_j^*), \vec{\psi})$, в которой наблюдения рассматриваются как некоторые фиксированные величины, а параметры — как переменные. Согласно методу максимального правдоподобия наилучшими оценками параметров являются оценки, которые приписывают максимальные вероятности тем значениям наблюдений,

которые в действительности получены. Поэтому задача оценивания параметров сводится к определению таких $\vec{\theta}_j$ и $\vec{\psi}^*$, которые удовлетворяют условию

$$L^{(j)}(\vec{\theta}_j^*, \vec{\psi}^*) = \max_{\vec{\theta}_j, \vec{\psi}} L^{(j)}(\vec{\theta}_j, \vec{\psi}). \quad (2.61)$$

В зависимости от плотности распределения вероятностей ошибок наблюдений ϵ определяется конкретный вид функции $L^{(j)}(\vec{\theta}_j, \vec{\psi})$. Так, если случайные величины ϵ_u ($u = 1, 2, \dots, n$) независимы и нормально распределены с нулевым средним и известными дисперсиями, то функция $L^{(j)}(\vec{\theta}_j, \vec{\psi})$ примет вид

$$L^{(j)}(\vec{\theta}_j, \vec{\psi}) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{n/2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{u=1}^n \frac{(\psi_u - f^{(j)}(\vec{x}_u, \vec{\theta}_j))^2}{\sigma_u^2}\right). \quad (2.62)$$

Тогда оценки параметров $\vec{\theta}_j^*$, полученные на основе метода максимального правдоподобия, будут эквивалентны соответствующим оценкам, полученным методом наименьших квадратов, т.е. оценкам, минимизирующим взвешенную сумму квадратов оценок ошибок наблюдений:

$$\Phi^{(j)}(\vec{\theta}_j) = \min_{\vec{\theta}_j} \Phi^{(j)}(\vec{\theta}_j) = \min_{\vec{\theta}_j} \sum_{u=1}^n \frac{[e_u^{(j)}(\vec{\theta}_j)]^2}{\sigma_u^2}. \quad (2.63)$$

При неизвестных, но равных дисперсиях наблюдений выражение (2.63) приводится к виду

$$F^{(j)}(\vec{\theta}_j^*) = \min_{\vec{\theta}_j} F^{(j)}(\vec{\theta}_j) = \min_{\vec{\theta}_j} \sum_{u=1}^n [e_u^{(j)}(\vec{\theta}_j)]^2. \quad (2.64)$$

Отметим, что при нормально распределенных ошибках наблюдений оценки параметров $\vec{\theta}_j$, найденные методом максимального правдоподобия и методом наименьших квадратов, совпадают и поэтому они обладают общими оптимальными свойствами.

Для многооткликовых моделей, т.е. моделей с несколькими выходными переменными, функция правдоподобия выборки $L^{(j)}(\vec{\theta}_j, \vec{\psi})$ при независимых нормально распределенных ошибках наблюдений имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} L^{(j)}(\vec{\theta}_j^*, \vec{\psi}^*) &= \prod_{u=1}^n p(\vec{e}_u^{(j)}(\vec{\theta}_j^*), \vec{\psi}^*) = \\ &= (2\pi)^{-Qn/2} \det(\Sigma)^{-n/2} \exp\left[-\frac{1}{2} \sum_{k=1}^Q \sum_{l=1}^Q \sigma^{kl} \sum_{u=1}^n e_{uk} e_{ul}\right] = \\ &= (2\pi)^{-Qn/2} \det(\Sigma)^{-n/2} \exp\left[-\frac{1}{2} \text{Sp}(\Sigma^{-1} A(\vec{\theta}_j^*))\right], \end{aligned} \quad (2.65)$$

где $\vec{e}_u^{(j)} = \vec{y}_u - \vec{f}^{(j)}(\vec{x}_u, \vec{\theta}_j^*) = (e_{u1}^{(j)}(\vec{\theta}_j^*), \dots, e_{uQ}^{(j)}(\vec{\theta}_j^*))^T$, $\vec{y}_u$ — u -мерный век-

тор измерений; $f^{(II)}(\vec{x}_u, \vec{\theta}_j)$ — Q -мерная вектор-функция, соответствующая модели M_j ; $\Sigma = \{\sigma_{kl}\}_{Q \times Q}$ — дисперсионно-ковариационная матрица измерений; i — индекс транспортирования; при этом

$$A(\vec{\theta}_j^*) = \Sigma \vec{e}_u(\vec{\theta}_j^*) \vec{e}_u(\vec{\theta}_j^*)^T. \quad (2.66)$$

$$\Sigma^{-1} = \{\sigma^{kl}\}_{Q \times Q}. \quad (2.67)$$

В соответствии с принципом максимального правдоподобия оценки параметров максимального правдоподобия $\vec{\theta}_j$ при известной дисперсионно-ковариационной матрице измерений максимизируют $L^{(II)}(\vec{\theta}_j^*, \vec{\psi}^*)$, если вектор параметров $\vec{\theta}_j^*$ минимизирует величину $\text{Sp}(\Sigma^{-1} A(\vec{\theta}_j^*))$:

$$SS_1(\vec{\theta}_j^*) = \text{Sp}(\Sigma^{-1} A(\vec{\theta}_j^*)) = \min_{\vec{\theta}_j^*} \text{Sp}(\Sigma^{-1} A(\vec{\theta}_j^*)). \quad (2.68)$$

Если матрица Σ — диагональная, то $\text{Sp}(\Sigma^{-1} A(\vec{\theta}_j^*))$ представляет собой взвешенную сумму квадратов остатков. Очевидно, что при $Q = 1$ выражение (2.68) совпадает с (2.63).

Если дисперсионно-ковариационная матрица ошибок наблюдений априори неизвестна, то, используя байесовский подход, оценки параметров максимального правдоподобия получают минимизацией по параметрам $\det A(\vec{\theta}_j^*)$:

$$SS_2(\vec{\theta}_j^*) = \det A(\vec{\theta}_j^*) = \min_{\vec{\theta}_j^*} \det(\vec{\theta}_j^*). \quad (2.69)$$

В ряде случаев, особенно при распределениях ошибок наблюдений, отличных от нормальных, использование метода максимального правдоподобия приводит к иным критериям, характеризующим степень близости расчетных и экспериментальных данных, чем (2.63), (2.64), (2.68). В частности, если ошибка распределена по Лапласу, то необходимо использовать для однократных ситуаций метод наименьших модулей и соответствующие критерии

$$SS_3(\vec{\theta}_j^*) = \sum_{u=1}^n |e_u^{(II)}(\vec{\theta}_j^*)| = \min_{\vec{\theta}_j^*} \sum_{u=1}^n |e_u^{(II)}(\vec{\theta}_j^*)|. \quad (2.70)$$

Интервальные оценки параметров. Выше говорилось о точечных оценках искомых параметров моделей, полученных методом максимального правдоподобия. Последние, хотя и обладают некоторыми оптимальными асимптотическими свойствами, но не обеспечивают важную дополнительную информацию о точности определяемых оценок и о мере нелинейности модели особенно в малых выборках. Такую информацию содержат характеристики доверительных областей.

Доверительный интервал (доверительная область) для некоторого параметра (совокупности параметров) функции распределения есть интер-

вал (область) в параметрическом пространстве, определяемый достаточной статистикой выборки измеренных величин и обладающий тем свойством, что вероятность того, что он содержит "истинное" значение параметра, равна по крайней мере наперед заданному значению α . Величину α называют *доверительным уровнем*.

Рассмотрим сначала случай, когда модель $f(\vec{x}, \vec{\theta})$ является линейной функцией параметров (т.е. $f(\vec{x}, \vec{\theta}) = x\vec{\theta}$). Оценки максимального правдоподобия $\vec{\theta}$ здесь являются наилучшими линейными несмещенными оценками $\vec{\theta}$, а точные доверительные области $\vec{\theta}$ могут быть построены с использованием декомпозиции суммы квадратов $\vec{e}^T \vec{e}$ на остаточную сумму квадратов $\text{res}(\vec{e})$ и сумму квадратов, обусловленную регрессией $\text{reg}(\vec{e})$, т.е.

$$\vec{e}^T \vec{e} = \text{reg}(\vec{e}) + \text{res}(\vec{e}), \quad (2.71)$$

где $\vec{e} = (e_1, e_2, \dots, e_n)^T$, $\text{reg}(\vec{e}) = (x^T \vec{e})^T (x^T x)^{-1} (x^T \vec{e})$ имеет ранг p и случайная величина $\text{reg}(\vec{e})/\sigma^2$ имеет χ^2 -распределение с p степенями свободы. Отсюда

$$\text{res}(\vec{e}) = \vec{e}^T \vec{e} - \text{reg}(\vec{e}) \quad (2.72)$$

имеет ранг $n - p$ и $\sigma^2 \chi^2$ -распределение с $n - p$ степенями свободы. Тогда точная 100 α %-ная доверительная область для $\vec{\theta}$ определяется неравенством

$$\text{reg}(\vec{y} - x\vec{\theta})/\text{res}(\vec{y} - x\vec{\theta}) \leq pF(\alpha, p, n - p)/(n - p), \quad (2.73)$$

где $F(\alpha; p, n - p)$ — верхняя 100 α %-ная точка F -распределения для p и $n - p$ степеней свободы; $\vec{y}$ — вектор наблюдений.

В случае достаточности оценки $\vec{\theta}$ остаточная сумма квадратов не зависит от $\vec{\theta}$, а зависит только от x и y .

Рассмотрим теперь задачу построения точных доверительных областей для параметров $\vec{\theta}$ в случае нелинейных относительно параметров моделей, общий интегральный вид которых может быть записан как $f(\vec{x}, \vec{\theta})$. Данная задача по сравнению с линейным случаем резко усложняется, так как для нелинейных по параметрам моделей не существует множества достаточных статистик. Однако при определенных условиях регулярности для $f(\vec{x}, \vec{\theta})$ и при многомерном нормальном распределении y_u ($u = 1, \dots, n$) существует множество статистик, совместно достаточных для $\vec{\theta}$; это имеет место тогда и только тогда, когда $f(\vec{x}, \vec{\theta})$ существенно линейна, т.е. может быть представлена в виде

$$f(\vec{x}_u, \vec{\theta}) = \sum w_i(\vec{\theta}) U_{ui}. \quad (2.74)$$

где $w_i(\vec{\theta})$ ($i = 1, \dots, p$) — непрерывные функции $\vec{\theta}$; $U = \{U_{ui}\}$ — матрица размерности $n \times p$ и ранга p .

Элементы матрицы U функционально не зависят от $\vec{\theta}$. Однако в общем случае $f(\vec{x}, \vec{\theta})$ не может быть представлена в виде (2.74), хотя иногда удается аппроксимировать $f(\vec{x}, \vec{\theta})$ достаточно точно p -членной линейной формой (2.74). При этом часто требуется проведение предварительной репараметризации функции $f(\vec{x}, \vec{\theta})$.

Для аппроксимации $f(\vec{x}, \vec{\theta})$ линейной формой необходимо разложить $f(\vec{x}, \vec{\theta})$ в подходящие многомерные ряды с их последующим усечением.

Выбор $w_i(\vec{\theta})$ осуществляют таким образом, чтобы было достигнуто наилучшее приближение $f(\vec{x}, \vec{\theta})$ усеченным рядом. Затем выбирают квадратичные формы

$$\text{reg}(\vec{e}) = (U^T \vec{e})^T (U^T U)^{-1} (U^T \vec{e}), \quad (2.75)$$

$$\text{res}(\vec{e}) = \vec{e}^T \vec{e} - \text{reg}(\vec{e}), \quad (2.76)$$

чтобы построить 100 α %-ные доверительные области для θ . При этом точность аппроксимации (2.74) практически не влияет на точность оценки вероятности выполнения неравенства (2.73). Однако $\text{reg}(\vec{e}) = \text{reg}(\vec{y} - f(\vec{x}, \vec{\theta}))$ и знаменатель в неравенстве (2.73) при нелинейной модели $f(\vec{x}, \vec{\theta})$ зависит от $\vec{\theta}$, хотя при "хорошей" аппроксимации эта зависимость "слабая". Конечно, в нелинейном случае выбор U (и соответственно $\text{reg}(\vec{e})$) в (2.75) неединственный.

Таким образом, в общем случае для нелинейно параметризованных моделей большая часть результатов, полученных для линейных моделей, неприменима. В самом деле, даже если ошибка измерений нормальна, вектор параметров может не быть нормально распределенной величиной. Далее, $\text{reg}(\vec{e})/(n-p) = \text{reg}(\vec{y} - f(\vec{\theta}))/(n-p) = S^2$ необязательно является несмещенной оценкой σ^2 . Более того, дисперсионно-ковариационная матрица оценок вектора параметров $\vec{\theta}$ может существенно отличаться от матрицы $\sigma^2 (\mathbf{x}^T \mathbf{x})^{-1}$.

Приближенно 100 α %-ные доверительные области определяются с помощью неравенства

$$S(\vec{\theta}) < S(\hat{\vec{\theta}}) \left\{ 1 + \frac{p}{n-p} F_{\alpha}(p, n-p) \right\}, \quad (2.77)$$

где $\hat{\vec{\theta}}$ — оценки максимального правдоподобия вектора параметров $\vec{\theta}$, причем для нормально распределенных измерений с постоянной дисперсией имеет место равенство

$$S(\hat{\vec{\theta}}) = \sum_{u=1}^n (y_u - f(x_u, \hat{\vec{\theta}}))^2. \quad (2.78)$$

В линейном случае выражение (2.77) дает точную 100 α %-ную доверительную область, однако в нелинейном случае доверительная вероятность лишь приближенно равна 100 α %.

Для линейных моделей $S(\vec{\theta})$ представляет собой квадратичную форму и, следовательно, доверительные области являются эллиптическими, для нелинейных они уже не эллиптические и, как правило, несимметричны и бананоподобны. Если нелинейно параметризованная модель содержит только два параметра, то контур доверительных интервалов сравнительно легко построить. Если же число параметров больше двух, то можно вычертить соответствующие сечения на координатных плоскостях. Рассматриваемая процедура построения доверительных областей обладает, однако, важными асимптотическими свойствами в том смысле, что действительная ("истинная") доверительная вероятность сходится к выбранному априори

значению, когда объем выборки неограниченно возрастает. Показано, что при определенных условиях регулярности оценки параметров $\hat{\theta}$ состоятельны и асимптотически нормальны. В таком случае множество $\hat{\theta}$, удовлетворяющих неравенству

$$S(\hat{\theta}) - S(\hat{\theta}) \leq \chi^2_{\alpha}(p), \quad (2.79)$$

определяет асимптотически 100 α %-ную доверительную область для θ .

Все же в большинстве случаев оценивание параметров в нелинейных моделях проводится по небольшим совокупностям экспериментальных данных и поэтому результаты асимптотической теории малоприменимы на практике.

Построение доверительных интервалов параметров нелинейных моделей может проводиться с учетом степени нелинейности модели. Мера, учитывающая степень нелинейности $f(x, \theta)$, позволяет установить, для каких нелинейно параметризованных моделей $f(x, \theta)$ без заметных погрешностей можно построить доверительные области, используя вместо $f(x, \theta)$ линейризованные модели. Однако при величинах меры нелинейности, больших единицы, данный метод построения доверительных областей становится уже непригодным.

Интервальные оценки параметров нелинейных моделей при сравнительно небольших затратах на вычислительную работу позволяет получить метод поочередной оценки приближений искомого параметра (джекнайф-метод). Этот метод, не требующий использования никаких предположений о нормальности ошибок измерений или их однородности, дает возможность определить оценки $\hat{\theta}$, которые асимптотически нормально распределены.

Метод поочередной оценки приближений искомого параметра. Пусть $n = gh$, где n, g, h — целые числа и $f(x, \theta)$ — однооткликковая модель, представленная в алгебраическом виде. Разобьем n -мерный вектор измерений $\bar{y}$ на g подвекторов $\bar{y}_i$, ($i = 1, \dots, g$), каждый из которых h -мерен. Пусть, далее, $\hat{\theta}$ — оценка искомого параметра, полученная методом наименьших квадратов по вектору измерений $\bar{y}$, а $\hat{\theta}_i$ — оценка $\hat{\theta}$, полученная также методом наименьших квадратов по вектору измерений $\bar{y}_i$ из которого выброшен подвектор $\bar{y}_i$. Тогда g псевдооценок $\hat{\theta}_i$ вычисляются следующим образом:

$$\hat{\theta}_i = g\hat{\theta} - (g-1)\hat{\theta}_{-i} \quad (i = 1, \dots, g). \quad (2.80)$$

Соотношения (2.80) используются для построения интервальных оценок параметров в нелинейных моделях. Для этого определим джекнайфную оценку $\hat{\theta}_J$ как вектор выборочного среднего выборки $\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2, \dots, \hat{\theta}_g$, т.е.

$$\hat{\theta}_J = \frac{1}{g} \sum_{i=1}^g \hat{\theta}_i, \quad (2.81)$$

и выборочную дисперсионно-ковариационную матрицу S для θ_i ($i = 1, \dots, g$):

$$S = \frac{1}{g-1} \sum_{i=1}^g (\tilde{\theta}_i - \hat{\theta}_j)(\tilde{\theta}_i - \hat{\theta}_j)^T. \quad (2.82)$$

Для проверки гипотезы о среднем значении и вычисления доверительного интервала в одномерном случае обычно используется статистика, получающаяся в результате деления разности между выборочным средним значением $\bar{\theta}$ и гипотетическим математическим ожиданием θ генеральной совокупности на среднееквадратическое отклонение σ . Если выборка произведена из совокупности $g(\theta, \sigma^2)$, то величина

$$t = \sqrt{g} \frac{\bar{\theta} - \theta}{\sigma} \quad (2.83)$$

имеет хорошо известное распределение Стьюдента (t -распределение) с $g-1$ степенями свободы, где g — объем выборки. Основываясь на этом, можно построить критерий для проверки гипотезы $\theta = \theta_0$, где θ_0 — заданное число, или построить доверительный интервал для неизвестного параметра θ .

Многомерным аналогом квадрата величины t , определенной формулой (2.83), является величина

$$T^2 = g(\bar{\theta} - \theta)^T S^{-1}(\bar{\theta} - \theta), \quad (2.84)$$

где $\bar{\theta}$ — вектор среднего значения, S — ковариационная матрица выборки объема g .

Для двух выборок T^2 -статистика была предложена Хотеллингом, который получил ее распределение.

Построим T^2 -статистику Хотеллинга. Если $\bar{\theta}$ — среднее значение многомерного нормального распределения $N(\bar{\theta}, \Sigma)$, то вероятность получить выборку объема g со средним $\bar{\theta}_j$ и выборочной ковариационной матрицей S такую, что

$$g(\bar{\theta} - \bar{\theta}_j) S^{-1}(\bar{\theta} - \bar{\theta}_j) < T_0^2(\alpha), \quad (2.85)$$

равна $(1-\alpha)$, где α — уровень значимости и

$$T_0^2(\alpha) = \frac{(g-1)p}{g-p} F_{p, g-p}(\alpha). \quad (2.86)$$

Совокупность точек $\bar{\theta}$, координаты которых удовлетворяют условию (2.85), образуют в p -мерном пространстве гиперэллипсоид, размеры и форма которого зависят от S^{-1} и уровня значимости α . Отметим, что эллипсоид, удовлетворяющий условию (2.85), конечно, является случай-

ным, так как случайна выборка $\bar{\theta}_1, \bar{\theta}_2, \dots, \bar{\theta}_g$.

Отметим, что численные значения оценки $\hat{\theta}_j$ при $g \neq n$ зависят от исходного разбиения вектора наблюдений y на подвекторы $y_1, y_2, \dots, y_g$, так как индивидуальные наблюдения в общем имеют неидентичные распределения. Если план эксперимента предусматривал проведение k повторных измерений в каждой из m точек ($n = km$), то обычно выбирают $g = k$ и исключают последовательно по одной полной реплике при конструировании процедуры джекнайф. Часто при применении этой процедуры пола-

гают, $h = 1$, что устраняет неопределенность в разбиении y на подвекторы $y_1, y_2, \dots, y_g$ и дает более надежные результаты.

Байесовские оценки параметров. В рассмотренных выше методах оценки параметров нелинейных моделей совсем не использовалась априорная (известная до эксперимента) информация о параметрах, которой во многих случаях располагает исследователь. Дело в том, что практически всегда еще до постановки эксперимента исследователь имеет некоторое представление о числовых значениях параметров модели. В частности, исходя из физического смысла изучаемого процесса, он может заранее исключить значения ряда параметров как невозможные, либо установить предпочтительность одних числовых значений параметров перед другими. Все свои априорные сведения исследователь закладывает в так называемом *априорном распределении параметров* $F_0(\vec{\theta})$ или *априорной плотности распределения* $p_0(\vec{\theta})$. Функция плотности распределения параметров $p_0(\vec{\theta})$ является неотрицательной и обладает следующим свойством: $p_0(\vec{\theta}_1)/p_0(\vec{\theta}_2) > 1$, если значения вектора параметров $\vec{\theta}_1$ правдоподобнее значений $\vec{\theta}_2$. При этом не требуется выполнения условий нормировки $\int p_0(\vec{\theta}) d\vec{\theta} = 1$. Очевидно, что равномерная априорная плотность распределения параметров $p_0(\vec{\theta}) = \text{const}$ характеризует ситуацию, когда все значения $\vec{\theta}$ равновероятны в допустимой области существования параметров.

После формализации априорных сведений об изучаемом процессе и построения априорной плотности распределения параметров $p_0(\vec{\theta})$ исследователь проводит эксперимент. При этом вся экспериментальная информация содержится в функции правдоподобия $L(\vec{\theta}|y)$. Тогда вся информация, характеризующая параметры $\vec{\theta}$, будет сосредоточена в *апостериорной (полученной после эксперимента) плотности распределения* $p(\vec{\theta}|y)$, которая согласно теореме Байеса имеет вид

$$p(\vec{\theta}|y) = \text{const} \cdot L(\vec{\theta}|y) \cdot p_0(\vec{\theta}), \quad (2.87)$$

$$\text{const} = \int L(\vec{\theta}|y) p_0(\vec{\theta}) d\vec{\theta}. \quad (2.88)$$

После построения апостериорной плотности распределения $p(\vec{\theta}|y)$ переходят к непосредственному расчету точечных оценок вектора параметров $\vec{\theta}$. В статистике оценки $\vec{\theta}$, использующие априорную информацию и вычисленные по апостериорной плотности распределения $p(\vec{\theta}|y)$, носят название *байесовских оценок*. Чаще всего в физико-химических исследованиях в качестве байесовской оценки параметров используют оценку $\vec{\theta}^*$, удовлетворяющую условию

$$p(\vec{\theta}^*|y) = \max_{\vec{\theta}} p(\vec{\theta}|y), \quad (2.89)$$

что является естественным обобщением метода максимального правдоподобия на задачи байесовского оценивания.

Оценки $\vec{\theta}^*$ иногда называют *обобщенными оценками максимального правдоподобия*. Они, в частности, совпадают с оценками максимального

правдоподобия, если плотность распределения $p_0(\theta)$ равномерна. Кроме того, вектор истинных значений параметров $\theta_{\text{ист}}$ сходится к θ^* при любом $p_0(\theta)$ и при неограниченном увеличении объема выборки. Следовательно, оценки $\hat{\theta}$ обладают свойствами состоятельности и асимптотической эффективности, как и оценки максимального правдоподобия.

Отметим в заключение, что построение точной апостериорной плотности распределения параметров θ возможно только для линейно параметризованных моделей. Однако большинство моделей химико-технологических процессов являются нелинейно параметризованными. Поэтому для них обычно требуется линеаризация по параметрам.

§ 2.3. Проверка адекватности моделей

Критерии адекватности моделей. Математическая модель объекта является лишь его определенным в рамках принятых допущений аналогом. Поэтому значения переменных, получаемые на модели и объекте, различаются. Здесь возникает задача установления близости модели реальному объекту (установления адекватности модели). Прежде чем приступить к проверке и установлению адекватности, необходимо выработать критерий, который позволил бы сделать заключение о соответствии модели и объекта. Они базируются в основном на методах дисперсионного анализа и анализа остатков.

Дисперсионный анализ моделей используется для сравнения величин остатков $e_{ij}^{(I)}(\hat{\theta}_j) = y_{ij}^{(I)} - f_{ij}^{(I)}(\hat{x}_{ij}, \hat{\theta}_j)$ с величинами ϵ_{ij} , характеризующими ошибку измерений. Используя такое сравнение, исследователь способен установить как общую адекватность модели, так и способы ее дальнейшего упрощения с помощью выбрасывания из модели незначимых членов. Для этого вычисляют величины сумм квадратов

$$SS(1) = \sum_{i=1}^n y_i^2 \quad \text{и} \quad SS(2) = \sum_{i=1}^n \eta_i^{(I)2} = \sum_{i=1}^n f_i^{(I)2}, \quad (2.90)$$

характеризующие соответственно разброс экспериментальных данных и разброс рассчитанных по модели значений отклика. Разности $e_{ij}^{(I)} = y_{ij} - f_{ij}^{(I)}$, называемые остатками, представляют собой меру неспособности модели точно описать экспериментальные данные. Очевидно, что если испытываемая модель истинна, то остатки фактически есть оценки экспериментальной ошибки измерений. Поэтому общая мера несоответствия модели результатам эксперимента $SS(3)$ представляется в виде

$$SS(3) = \sum_{i=1}^n (y_i - f_i^{(I)})^2. \quad (2.91)$$

В статистике величина $SS(1)$ называется общей суммой квадратов; $SS(2)$ — суммой квадратов, обусловленной регрессией, и $SS(3)$ — остаточной суммой квадратов.

На основании метода наименьших квадратов можно показать, что для перечисленных сумм справедливо следующее равенство:

$$SS(1) = SS(2) + SS(3). \quad (2.92)$$

При проведении дисперсионного анализа каждому отдельному измерению отклика приписывается одна степень свободы. Следовательно, при постановке n опытов для однооткликовой ситуации (ситуации с одной измеряемой выходной переменной) общая сумма квадратов $SS(1)$ обладает n степенями свободы; $SS(3)$ имеет $(n - p_j)$ и $SS(2)$ имеет p_j степеней свободы (p_j — число параметров в модели j , с использованием оценок которых вычисляется сумма $SS(2)$).

При проведении повторных измерений в одинаковых условиях эксперимента сумма квадратов $SS(4) = \sum_{u=1}^N (y_u - \bar{y})^2$, где $\bar{y} = \sum_{u=1}^N y_u / N$, содержит всю необходимую информацию об ошибках измерений. Тогда величина $SS(5)$, равная разности между $SS(3)$ и $SS(4)$, т.е.

$$SS(5) = \sum_{u=1}^N (y_u - f^{(III)}_u)^2 - \sum_{u=1}^N (y_u - \bar{y})^2. \quad (2.93)$$

определяет меру способности модели отражать результаты эксперимента; иначе говоря, сумма квадратов $SS(5)$ характеризует степень адекватности модели, так как чем меньше сумма $SS(5)$, тем лучше модель воспроизводит эксперимент.

Если проведено $\bar{n}$ повторных опытов при каждом из q различных условий проведения эксперимента, то сумма квадратов $SS(4)$ имеет $\bar{n} - 1$ степеней свободы в одном повторном эксперименте (одна степень свободы используется для оценки y), в то время как сумма квадратов $SS(5)$ обладает $n - p_j - q(\bar{n} - 1)$ степенями свободы: последнее число определяется как разность между числом степеней свободы остаточной суммы квадратов $SS(3)$ и суммы квадратов ошибок измерений $SS(5)$.

Суммы квадратов, обусловленные различными источниками, будучи поделенными на соответствующие числа степеней свободы, определяют соответствующие дисперсии. Очевидно, что адекватность модели может определяться отношением дисперсии адекватности модели к дисперсии воспроизводимости (F -статистика). Если это отношение велико (по крайней мере существенно больше единицы), то имеются достаточно веские доводы в пользу того, что испытываемая модель не отражает результаты эксперимента.

Если модель правильно отражает свойства объекта, то расхождение между экспериментальными значениями и соответствующими значениями, вычисленными по модели, можно рассматривать как случайные величины. Тогда установление адекватности можно проводить с помощью проверки некоторых статистических гипотез. Под статистическими гипотезами понимаются некоторые предположения относительно распределения генеральной совокупности случайной величины. Проверка гипотезы заключается в со-

поставлении статистических показателей, критериев проверки, вычислениях по выборке, со значениями этих показателей, определенными в предположении, что проверяемая гипотеза верна. Чтобы принять или отвергнуть гипотезу, задают уровень значимости p (обычно от 0,1 до 5 %), который определяет вероятность того, что верная гипотеза будет отвергнута на основании анализа выборки.

Оценка адекватности однофакторных моделей с помощью критерия Фишера. В случае однофакторных моделей адекватность может быть проверена с помощью критерия Фишера (F -критерия). Для этого находят отношение

$$F = \frac{S_{ад}^2}{S_{воспр}^2}, \quad (2.94)$$

где $S_{ад}^2$, $S_{воспр}^2$ — соответственно дисперсия адекватности и дисперсия воспроизводимости, определяемые как

$$S_{ад}^2 = \frac{SS(5)}{f_{ад}} = \frac{SS(3) - SS(4)}{f_{ад}}, \quad (2.95)$$

$$S_{воспр}^2 = \frac{SS(4)}{f_{воспр}}. \quad (2.96)$$

Число степеней свободы дисперсии адекватности составляет

$$f_{ад} = n - p_1, \quad (2.97)$$

если дисперсия воспроизводимости определялась в отдельной серии опытов (p_1 — число устанавливаемых параметров /-й модели), и

$$f_{ад} = n - p_1 - q(\tilde{n} - 1), \quad (2.98)$$

если в каждом из q различных условий проведения эксперимента проводилось $\tilde{n}$ повторных опытов.

Число степеней свободы дисперсии воспроизводимости в случае проведения отдельной серии из $\tilde{n}$ повторных экспериментов есть

$$f_{воспр} = \tilde{n} - 1, \quad (2.99)$$

а в случае, когда в каждом из q различных условий эксперимента выполняется $\tilde{n}$ опытов, оно равно

$$f_{воспр} = q(\tilde{n} - 1). \quad (2.100)$$

Основная гипотеза, которая при этом проверяется, состоит в следующем: можно ли считать сравниваемые выборочные дисперсии оценками одной и той же генеральной дисперсии? Если да, то дисперсии незначимо отличаются друг от друга. Рассчитанные по модели значения $f(\vec{\theta}, \vec{x})$ удовлетворительно совпадают с экспериментальными y , и модель адекватна объекту. В противном случае модель неадекватна объекту. В качестве критерия отличия дисперсий часто используется

критерий Фишера (F -критерий), определенный для v^2 -распределения случайной величины. При этом F -распределение (v^2 -распределение) зависит только от числа степеней свободы $f_{ад}$ и $f_{воспр}$.

Значения F -распределения для различных степеней свободы $f_{ад}$ и $f_{воспр}$ приведены в литературе по статистике.

Если $F = \frac{S_{ад}^2}{S_{воспр}^2}$ окажется меньше табличного значения критерия

Фишера $F_{1-p}(f_1, f_2)$ для уровня значимости p и чисел степеней свободы $f_1 = f_{ад}$ и $f_2 = f_{воспр}$, то гипотеза верна, т.е. дисперсии $S_{ад}^2$ и $S_{воспр}^2$ незначимо отличаются друг от друга и модель адекватна объекту.

Оценка модели относительно среднего значения. При отсутствии параллельных опытов и дисперсии воспроизводимости качество модели можно оценить, сравнив $S_{ад}^2$ и дисперсию относительно среднего

$$S_{ср}^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}{n-1}, \text{ где } \bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i. \quad (2.101)$$

Для этого используют критерий Фишера и составляют отношение

$$F = \frac{S_{ср}^2(f_1)}{S_{ад}^2(f_2)}, \quad (2.102)$$

которое показывает, во сколько раз уменьшается рассеяние относительно результата, полученного по модели, по сравнению с рассеянием относительно среднего значения наблюдаемой переменной y .

Как и в предыдущем случае, отношение выборочных дисперсий $S_{ср}^2/S_{ад}^2$ сравнивают с табличным значением критерия Фишера $F_{1-p}^{табл}(f_{ср}, f_{ад})$ для заданного уровня значимости p . Если

$$\frac{S_{ср}^2}{S_{ад}^2} < F_{1-p}^{табл}(f_{ср}, f_{ад}), \quad (2.103)$$

то дисперсии незначимо отличаются друг от друга и, следовательно, гипотеза о том, что дисперсии $S_{ср}^2$ и $S_{ад}^2$ принадлежат одной и той же генеральной совокупности, верна. Тогда использовать модель нецелесообразно, так как она обладает одинаковой прогнозирующей способностью со средним значением, но использовать в качестве модели постоянную величину проще. Наоборот, если

$$\frac{S_{ср}^2}{S_{ад}^2} > F_{1-p}^{табл}(f_{ср}, f_{ад}), \quad (2.104)$$

то дисперсии $S_{ср}^2$ и $S_{ад}^2$ значимо отличаются друг от друга (причем $S_{ср}^2 > S_{ад}^2$). В качестве модели нельзя принять постоянную величину и использование проверяемой модели является целесообразным.

Рассмотренная проверка часто называется *проверкой целесообразности использования модели*.

Проверка гипотезы о законе распределения с помощью χ^2 -критерия и ω^2 -критерия. Если имеется выборочный закон распределения какой-либо величины (получаемый из эксперимента) и закон распределения генеральной совокупности (определяемый моделью), то адекватность модели эксперименту можно установить путем проверки гипотезы о предполагаемом законе распределения. Проверка осуществляется с помощью критериев согласия, определяющих вероятность того, что при гипотетическом законе распределения наблюдающиеся в рассматриваемой выборке отклонения вызываются случайными причинами, а не ошибкой в гипотезе. Если эта вероятность велика, то отклонение от гипотетического закона распределения следует признать случайным и считать, что гипотеза о предполагаемом законе распределения, определяемом моделью, не опровергается. Часто в качестве критерия проверки статистических гипотез используется критерий Пирсона (χ^2 -критерий).

Для применения χ^2 -критерия весь диапазон изменения случайной величины в выборке объема n разбивается на k интервалов. Число интервалов k обычно берут в зависимости от объема выборки в пределах от 8 до 20, но так, чтобы в каждом интервале было по 5–8 точек. Число элементов выборки, попавших в i -й интервал, обозначим через n_i . Теоретическая вероятность (по модели) попадания случайной величины X в i -й интервал равна p_i . Тогда величина, характеризующая отклонение выборочного распределения от теоретического, определяется так:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^k \frac{(n_i - np_i)^2}{np_i}. \quad (2.105)$$

Последняя сумма имеет приближенно χ^2 -распределение со степенью свободы $f = k - c - 1$ (c — число параметров модели, определяемых по выборке).

Гипотеза о принятом законе распределения принимается при данном уровне значимости p , если

$$\chi^2 < \chi_{1-p}^{2 \text{ табл}}(f). \quad (2.106)$$

где $\chi_{1-p}^{2 \text{ табл}}$ — квантиль χ^2 -распределения для уровня значимости p . Отметим, что для использования χ^2 -распределения желательно, чтобы объем выборки был достаточно велик ($n \geq 50$).

В отличие от критерия χ^2 критерий ω^2 (критерий Крамера — Мизеса — Смирнова) основан на непосредственно наблюдаемых несгруппированных значениях случайной величины X .

Пусть имеется выборка объема n случайной величины X . Проверяется гипотеза о том, что функция распределения случайной величины есть $F(x)$. Для сравнения эмпирического распределения $F_n(x)$ с предполагаемым теоретическим $F(x)$ (по модели) рассмотрим величину

$$\omega^2 = n \int_{-\infty}^{+\infty} [F_n(x) - F(x)]^2 dF(x). \quad (2.107)$$

Разбивая область интегрирования на участки $(-\infty, x_1), (x_1, x_2), \dots$, приходим к выражению

$$\omega^2 = \frac{1}{12n} + \sum_{j=1}^n [F(x_j) - \frac{2j-1}{2n}]^2. \quad (2.108)$$

При $n > 40$ распределение произведения $n\omega_n^2$ близко к предельному $n\omega^2$ распределению, для которого составлены таблицы.

Если вычисленное значение $n\omega^2$ меньше табличного $n\omega^2_{1-p}$, то гипотеза о совпадении теоретического закона распределения $F(x)$ с выборочным $F_n(x)$ принимается.

Анализ значимости отдельных составляющих модели. Изложенные процедуры проверки адекватности однооткликовых моделей еще не гарантируют статистической значимости отдельных ее членов. Следовательно, необходимо проведение более детального анализа составляющих модели. Для этого дополнительно разлагают суммы квадратов, обусловленных регрессией, на ряд составляющих. При этом обычно для простоты анализа вычисляют суммы квадратов, обусловленные общей регрессионной моделью и упрощенной моделью с выброшенными одним или группой членов. Разность между этими двумя суммами квадратов представляет собой сумму квадратов, характеризующую влияние испытываемого компонента модели. Так как известно, что для адекватных моделей средний квадрат остатков характеризует дисперсию воспроизводимости, то выполняется условие

$$\frac{SS(6)}{SS(5)} > F_\alpha(1, n - p_j - q(n - 1)), \quad (2.109)$$

где $SS(6)$ — средний квадрат, обусловленный испытываемым компонентом модели, а $SS(5)$ — средний квадрат остатков, определяющий значимость испытываемого компонента модели. Очевидно, что такие испытания надо проводить для всех членов (компонентов) математической модели.

Отметим, что результаты дисперсионного анализа позволяют сделать вывод лишь об общей пригодности модели или значимости ее отдельных членов. Тем не менее неадекватность последней может иметь место, даже если критерии типа Фишера указывают на соответствие модели экспериментальным данным. Поэтому требуется проведение более детального испытания моделей, которые осуществляют с помощью методов анализа остатков.

Остатки $e_u = y_u - f^{(M)}(\bar{x}_u, \bar{\theta}_j)$ как случайные величины обладают вполне определенной функцией распределения вероятностей, причем она в большинстве встречающихся на практике случаев представляет собой нормальную функцию распределения с нулевым средним и дисперсией $\sigma_{\text{ос}}^2$. Очевидно, что установление адекватности модели только по какой-либо одной характеристике функции распределения (для критерия Фишера такой характеристикой является дисперсия) не может дать полной гарантии

адекватности модели. Поэтому для комплексной проверки соответствия модели экспериментальным данным необходимо использовать или целиком функции распределения вероятностей, — что требует постановки большого числа опытов, — или же ее основные характеристики. Часто такая проверка включает анализ нормальности распределения остатков и анализ отсутствия в них случайных составляющих.

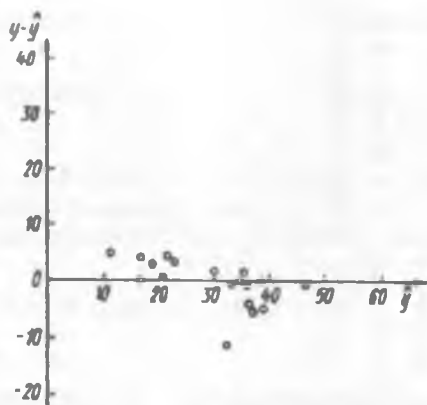


Рис. 2.2. Зависимость остатков от предсказанного значения отклика

При анализе нормальности распределения строят гистограммы распределения нормированных частот появления остатков в зависимости от их числовых значений. Подобные гистограммы должны приближенно отвечать нормальному закону распределения.

При этом гипотеза о нормальности может быть проверена по различным статистическим критериям. Наряду с ней дополнительно проверяют также гипотезу о равенстве нулю математического ожидания выборочного распределения, для чего используют как графические методы, так и методы линейного или нелинейного регрессионного анализа.

Анализ отсутствия в остатках случайных составляющих производят с помощью построения и изучения графической зависимости остатков от предсказанных значений откликов, что дает возможность установить соответствие модели экспериментальным данным. Так, например, из результатов анализа графика остатков (рис. 2.2) непосредственно следует, что общая адекватность модели достигается благодаря сбалансированию остатков e_i для малых и больших величин откликов. Следовательно, модель необходимо отвергнуть как неадекватную.

Анализ графической зависимости остатков от рассчитанных по модели значений откликов позволяет также получить дополнительную информацию о соблюдении ряда исходных статистических посылок относительно характеристики ошибок измерений и, в частности, относительно соблюдения условия постоянства дисперсии воспроизводимости в выбранной области экспериментирования (рис. 2.3).

При этом если, например, разброс величин остатков монотонно увеличивается или монотонно уменьшается на таких графиках, то дисперсия ошибки воспроизводимости является переменной величиной и необходимо использовать метод наименьших квадратов с переменными весовыми коэффициентами, либо для сохранения постоянства дисперсии провести преобразование зависимой переменной $\eta = f(\hat{y}_j)(x, \hat{\theta}_j)$.

Аналогично, построение графических зависимостей остатков от управляемых переменных и времени, а также графических зависимостей оценок

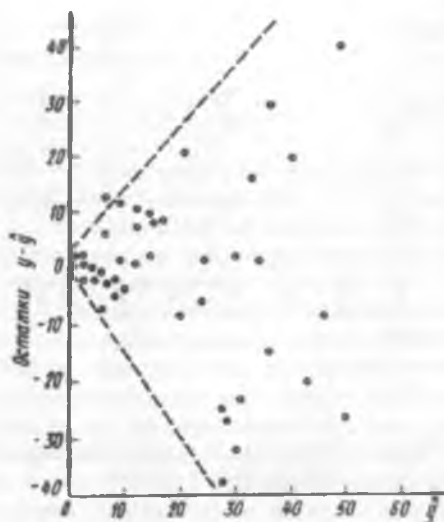


Рис. 2.3. Влияние отклика на величину остатков

параметров от управляемых переменных позволяет получить важную информацию о возможных скрытых неадекватностях в модели. Для этого исследуют графики зависимостей остатков от уровней независимых управляемых переменных. Детальное исследование подобных зависимостей позволяет провести качественный анализ соответствия модели экспериментальным данным, а также наметить пути устранения возможных неадекватностей.

Установление адекватности многооткликовых моделей. Процедура установления адекватности многооткликовых моделей значительно сложнее и требует использования значительной по объему эксперимен-

тальной информации, так как здесь в противоположность однооткликовому случаю требуется проверить гипотезу не о равенстве двух дисперсий, а о равенстве двух ковариационных матриц Σ_1 и Σ .

Матрица Σ_1 определяется как $\Sigma_1 = A_1(\vec{\theta}_1)/(n - p_1)$, где n — общее число измерений; p_1 — минимальное число опытов, необходимое для оценки параметров модели;

$$A_1(\vec{\theta}_1) = \sum_{u=1}^n \vec{e}_u(\vec{\theta}_1^*) \vec{e}_u^T(\vec{\theta}_1^*).$$

Выборочная ковариационная матрица измерений Σ находится по формуле

$$\Sigma = \sum_{u=1}^{n_2} (\vec{y}_u - \vec{y})(\vec{y}_u - \vec{y})^T / (n_2 - 1) = A_2 / (n_2 - 1), \quad (2.110)$$

где $\vec{y}_1, \dots, \vec{y}_{n_2}$ — повторная выборка объема n_2 ; $\vec{y} = \sum_{u=1}^{n_2} \vec{y}_u / n_2$.

Для проверки гипотезы $H: \Sigma_1 = \Sigma$ часто используют статистику V_1 Бартлетта, которая имеет вид

$$V_1 = \frac{\det(A_2)^{0.5n_1} \det(A_1(\vec{\theta}_1))^{0.5(n-p_1)}}{\det(A)^{0.5n_3}}, \quad (2.111)$$

где $A = A_1(\vec{\theta}_1) + A_2$, $n_1 = n_2 - 1$; $n_3 = n_1 + n - p_1$.

Однако удобнее использовать не V_1 , а величину W_1 , являющуюся функцией от V_1 :

$$W_1 = V_1 \left[\left(\frac{1}{k_1} \right)^{k_1} \left(\frac{1}{k_2} \right)^{k_2} (1/2)^{pn_3} \right], \quad (2.112)$$

где $k_1 = n_1/n_3$; $k_2 = (n - p_j)/n_3$; $k_1 + k_2 = 1$; $k_1 > 0$; $k_2 > 0$; p — число строк (соответственно число столбцов) матриц Σ_1 или Σ .

Гипотеза H принимается как соответствующая результатам эксперимента, если

$$P \left\{ -\rho \lg W_1 \leq z \right\} = P \left\{ \chi_F^2 \leq z \right\} + w_2 \left[P \left\{ \chi_{F+4}^2 \leq z \right\} + P \left\{ \chi_F^2 \leq z \right\} \right] + O(n^{-3}) \geq 1 - \alpha, \quad (2.113)$$

где α — выбранный уровень значимости; χ_F^2 — случайная переменная, распределенная по χ^2 закону с f степенями свободы; при этом

$$f = 0,5p(p+1), \quad (2.114)$$

$$\rho = 1 - \left(\frac{1}{n_1} + \frac{1}{n - p_j} + \frac{1}{n_3} \right) \frac{2p^2 + 3p - 1}{6(p+1)}, \quad (2.115)$$

$$w^2 = \frac{p(p+1)}{48\rho^2} \left[(p-1)(p+2) \left(1/n_1^2 + 1/(n-p_j)^2 - 1/(n_3)^2 \right) - 6(1-\rho)^2 \right]. \quad (2.116)$$

Пример 1. Используя метод поочередной оценки приближенный искомого параметра, выполнять оценку кинетических параметров θ_1 и θ_2 не обратимых мономолекулярных реакций $A \xrightarrow{\theta_1} B \xrightarrow{\theta_2} C$, протекающих в аппарате полного перемешивания.

Изменение концентрации продукта B во времени можно представить в виде

$$C_B = \frac{\theta_1}{\theta_1 - \theta_2} (e^{-\theta_2 t} - e^{-\theta_1 t}), \quad (2.117)$$

где t — время проведения процесса. При выводе соотношения (2.117) предполагается, что сначала загружается только вещество A и его начальная концентрация равна 1 моль/л. Начальные концентрации веществ B и C равны нулю. Задача параметрической идентификации в этом случае сводится к задаче оценки параметров в алгебраической модели.

Решение. Полагаем, что измерение C_B проводится в шести временных точках, т.е. $x = (t_1, t_2, t_3, t_4, t_5, t_6)^T = (0,5; 1; 2; 4; 8; 16)^T$, причем в каждой точке t_i ($i = 1, \dots, 6$) предусматривается постановка четырех повторных экспериментов. По результатам этих опытов с помощью метода наименьших квадратов получены оценки параметров: $\theta_1 = 0,2116$, $\theta_2 =$

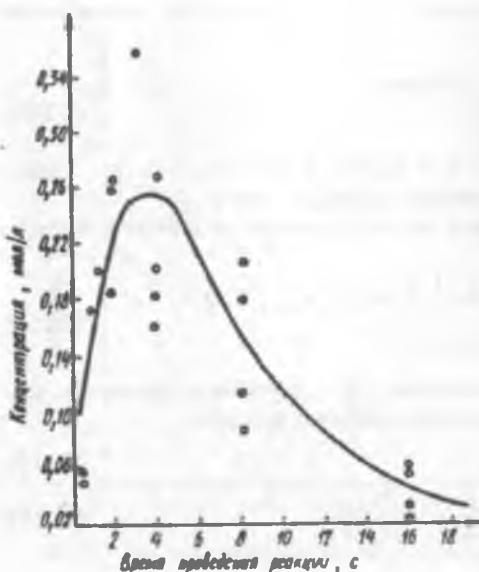


Рис. 2.4. Регрессионная кривая и результаты измерений

оценки вычислены по формуле (2.80). Так, чтобы получить первую псевдооценку, первое наблюдение выбрасываем из совокупности измерений и по оставшимся измерениям находим оценки для θ_1 и θ_2 методом наименьших

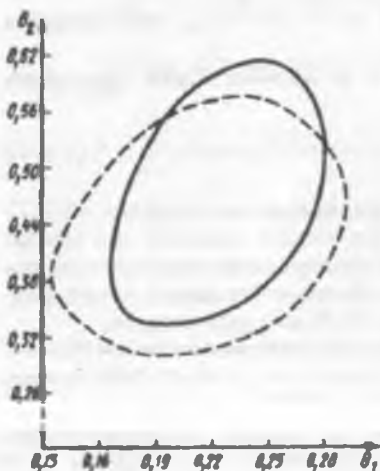


Рис. 2.5. Совместные доверительные области оценок параметров θ_1 и θ_2 :
 — метод наименьших квадратов;
 — метод последовательной оценки приближенный искомого параметра

квадратов. В результате имеем $\theta_{-1} = (0,2191, 0,4529)$. Отсюда получаем значения псевдооценок θ_1 :

$$\theta_1 = 24(0,2116, 0,4461) - 23(0,2191, 0,4529) = (0,0395, 0,2907).$$

В табл. 2.1 представлены все 24 вычисленные псевдооценки. Оценки вектора $\bar{\theta}$, найденные методом поочередной оценки приближений искомого параметра, равны среднему значению совокупности $\bar{\theta}_i$ ($i = \overline{1,24}$) или $\bar{\theta}_j = (0,2103, 0,4443)$. Дисперсионно-ковариационная матрица $\bar{\theta}_j$ также равна среднему значению совокупности выборочных дисперсионно-ковариационных матриц псевдооценок, т.е.

$$\frac{1}{24}S = \frac{1}{24} \begin{Bmatrix} 0,02022 & 0,01536 \\ 0,01536 & 0,06441 \end{Bmatrix} = 10^{-4} \begin{Bmatrix} 8,34 & 6,40 \\ 6,40 & 26,84 \end{Bmatrix}.$$

Теперь находим 95 %-ные доверительные интервалы для θ_1 и θ_2 ; соответственно получим $0,2103 \pm 0,06019 = (0,1501, 0,2705)$ и $0,4443 \pm 0,1075 = (0,3368, 0,5518)$.

Доверительная область для θ_1 и θ_2 , найденная методом поочередной оценки приближений искомого параметра, представлена как область внутри пунктирной кривой. Эта доверительная область эллиптическая. Из рис. 2.5, в частности, следует, что хотя доверительные области для θ_1 и θ_2 заметно отличаются, их индивидуальные доверительные интервалы практически совпадают.

Таблица 2.1

Псевдооценки параметров θ_1 и θ_2

Номер псевдо- оценки	Параметры		Номер псевдо- оценки	Параметры	
	θ_1	θ_2		θ_1	θ_2
1	0,0395	0,2907	13	0,1161	0,7626
2	0,1187	0,3620	14	0,1793	0,6762
3	0,0411	0,2921	15	0,2320	0,2821
4	0,1359	0,3775	16	0,1470	0,8789
5	0,2126	0,4466	17	0,2823	0,6977
6	0,2803	0,4936	18	0,0026	0,0757
7	0,2134	0,4471	19	0,0756	0,0270
8	0,3712	0,5571	20	0,3392	0,9037
9	0,6897	0,4816	21	0,1713	0,3614
10	0,0915	0,4448	22	0,2385	0,5029
11	0,3108	0,4492	23	0,1629	0,3440
12	0,3261	0,4500	24	0,2198	0,4635

Пример 2. Исследовалась гидродинамика потока жидкости на тарелке ректификационной колонны. Вводили трассер и измеряли отклик на выходе из тарелки. Для описания поведения потока жидкости была предложена линейная модель, содержащая один устанавливаемый параметр — число ячеек. Из экспериментальных данных было установлено, что число

ячеек равно 6. Требуется установить адекватность ячеечной модели эксперименту.

Результаты эксперимента и расчета по модели приведены в табл. 2.2.

Для оценки дисперсии воспроизводимости была поставлена отдельная серия опытов (табл. 2.3).

Таблица 2.2

Результаты эксперимента и расчета по модели

τ, мин	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
$C_{г/л}$	3	30	135	253	266	210	135	77	43	26	17	12	9	7	5	3	2	1,5	1	0
$C_{г/л}$	4,9	54	143	210	223	194	145	99	62	36	20	11	6	3	1,4	0,7	0,3	0,2	0,1	0,03

Таблица 2.3

Значения концентрации в серии опытов при постоянных условиях

Номер опыта	1	2	3	4	5	6
$C_3, г/л$	25	18	22	29	35	23

Р е ш е н и е. Будем устанавливать адекватность, используя критерий Фишера. Составим F -отношение:

$$F = \frac{S_{ад}^2}{S_{воспр}^2}.$$

Прежде чем найти его значение по имеющимся выборкам, вычислим значения дисперсий адекватности и воспроизводимости:

$$S_{ад}^2 = \frac{\sum_{i=1}^{20} (C_i^2 - \bar{C}_i^2)}{n - p} = \frac{5701,3}{20 - 1} = 300,1, \quad (2.118)$$

$$S_{воспр}^2 = \frac{\sum_{i=1}^6 (C_i^2 - \bar{C}^2)}{m - 1} = 35,6, \quad (2.119)$$

где $\bar{C}$ — среднее значение концентрации в серии экспериментов по оценке воспроизводимости, равное

$$\bar{C} = \frac{\sum_{i=1}^6 C_i}{6} = 25,3; \quad (2.120)$$

($n - p$) и ($m - 1$) — число степеней свободы соответственно дисперсии адекватности и дисперсии воспроизводимости.

Найдем теперь величину F -отношения, имеем

$$F = \frac{S_{ад}^2}{S_{воспр}^2} = 8,4. \quad (2.121)$$

Соответствующее табличное значение критерия Фишера для чисел степеней свободы 19 и 5 и уровня значимости $\alpha = 0,01$ составляет $F_{0,01}^{\text{табл}}(19,5) = 9,5$. Таким образом, выборочное отношение $F < F_{0,01}^{\text{табл}}(19,5)$ и, следовательно, ячеечная модель адекватна эксперименту.

Оценим целесообразность использования ячеечной модели для описания движения потока жидкости на ректификационной тарелке, сравнив дисперсию относительно среднего $S_{\text{ср}}^2$ и дисперсию адекватности $S_{\text{ад}}^2$. Для этого составим F -отношение в виде

$$F = \frac{S_{\text{ср}}^2}{S_{\text{ад}}^2}, \quad (2.122)$$

где

$$S_{\text{ср}}^2 = \frac{\sum_{i=1}^{20} (C_i^2 - \bar{C})^2}{n - 1} = 7837,5, \quad (2.123)$$

а $\bar{C}$ определяется как средняя концентрация по всем 20 опытам, т.е.

$$\bar{C} = \frac{\sum_{i=1}^{20} C_i}{20} = 60,8. \quad (2.124)$$

Найдем величину F -отношения:

$$F = \frac{7837,5}{300,1} = 26,1. \quad (2.125)$$

Соответствующее табличное значение критерия Фишера для чисел степеней свободы 19 и 19 составляет $F^{\text{табл}}(19,19) = 3,0$ и, так как $F > F^{\text{табл}}$, то ячеечную модель использовать целесообразно.

Пример 3. Методом ступенчатого возмущения исследовалась структура потока жидкости в аппарате. На основании эксперимента был получен выборочный закон распределения элементов потока по времени пребывания $F_2(\theta)$ (табл. 2.4). Одновременно для описания структуры потока жидкости использовалась ячеечная модель, для которой рассчитывался соответствующий закон распределения элементов потока по времени пребывания. Экспериментальный и теоретические законы распределения приведены в таблице. Требуется установить соответствие теоретического закона распределения элементов потока по времени пребывания экспериментальному.

Решение. Воспользуемся сначала χ^2 -критерием. Для этого разобьем весь интервал изменения безразмерного времени пребывания θ на части и определим в каждом из них экспериментальное число появлений n_i случайной величины θ и теоретическую вероятность p_i появления случайной величины в данном интервале (табл. 2.5).

Таблица 2.4

Значения экспериментального и теоретического законов распределения элементов потока
по времени пребывания (θ — безразмерное время)

$F(\theta)_2$	0.015	0.025	0.045	0.070	0.105	0.145	0.190	0.240	0.300	0.360	0.415	0.475
$F(\theta)_T$	0.025	0.040	0.060	0.080	0.120	0.155	0.200	0.240	0.295	0.345	0.385	0.430
$F(\theta)_3$	0.535	0.585	0.635	0.675	0.720	0.755	0.790	0.815	0.835	0.855	0.875	0.890
$F(\theta)_T$	0.470	0.515	0.555	0.595	0.635	0.675	0.710	0.740	0.775	0.800	0.825	0.845
$F(\theta)_2$	0.900	0.910	0.920	0.925	0.935	0.945	0.950	0.955	0.960	0.965	0.970	0.975
$F(\theta)_T$	0.860	0.875	0.890	0.905	0.915	0.920	0.930	0.935	0.940	0.945	0.950	0.955
$F(\theta)_3$	0.980	0.985	0.990	0.995								
$F(\theta)_T$	0.960	0.965	0.970	0.975								

Таблица 2.5

Число появления n_i и теоретическая вероятность p_i
появления случайной величины θ

Интервал θ	0-0,704	0,704- -1,408	1,408- -2,112	2,112- -2,816	2,816- -3,520
n_i	9	17	9	3	2
Теоретическая вероят- ность p_i	0,215	0,355	0,250	0,090	0,040

Вычислим величину χ^2 , имеем

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^5 \frac{(n_i - np_i)^2}{np_i} = 0,871. \quad (2.126)$$

Число степеней свободы составляет $f = k - c - 1 = 5 - 1 - 1 = 3$. Соответствующее табличное значение χ^2 -критерия для числа степеней свободы 3 и уровня значимости $\alpha = 0,01$ есть $\chi^2_{\alpha=0,01}^{\text{табл}}(3) = 11,3$. Так как $\chi^2 < \chi^2_{\alpha=0,01}^{\text{табл}}$, то можно принять гипотезу о соответствии выборочного и теоретического законов распределения времени пребывания элементов потока в аппарате.

Сравним теперь законы распределения, используя ω^2 -критерий. Для этого вычислим величину

$$n\omega^2 = \frac{1}{12n} + \sum_{i=1}^n [F_i^3(\theta) - F_i^2(\theta)]^2 = 0,093. \quad (2.127)$$

Для $n = 40$ и уровня значимости $\alpha = 0,01$ соответствующее значение критерия $n\omega^2$ составляет $n\omega^2_{\alpha=0,01}^{\text{табл}} = 0,744$. Так как $n\omega^2 < n\omega^2_{\alpha=0,01}^{\text{табл}}$, то теоретический закон распределения адекватно описывает экспериментальный.

Глава III

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ СТРУКТУРЫ ПОТОКОВ В АППАРАТЕ — ОСНОВА ПОСТРОЕНИЯ МОДЕЛЕЙ

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. Как уже отмечалось, точное описание

реальных потоков (например, с помощью уравнения Навье—Стокса) 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).

При проведении химико-технологических процессов часто важно знать степень полноты их завершения, что, в свою очередь, зависит от распределения по времени пребывания частиц потока в аппарате, поскольку некоторые доли потока могут задерживаться в аппарате, а другие, наоборот, проскакивать, что непосредственно связано с временем контакта и диффузией.

Распределение времени пребывания частиц потока в аппарате (РВП) имеет стохастическую природу и оценивается статистическим распределением.

Наиболее существенными источниками неравномерности распределения элементов потока по времени пребывания в промышленных аппаратах являются: 1) неравномерность профиля скоростей системы; 2) турбулизация потоков; 3) наличие застойных областей в потоке; 4) каналообразование, байпасные и перекрестные токи в системе; 5) температурные градиенты движущихся сред; 6) тепло- и массообмен между фазами и т.п.

Может оказаться, что истинное время пребывания в аппарате частиц потока недостаточно для осуществления процесса диффузии, а от этого зависит эффективность всего диффузионного процесса в целом. Поэтому важным является учет реальной структуры потоков фаз в аппарате (а, следовательно, по времени пребывания) с помощью модельных представлений о внутренней структуре потоков.

Для процессов массопередачи описание структуры потоков имеет еще и тот смысл, что позволяет установить перемещение и распределение веществ в этих потоках. Поэтому все гидродинамические модели потоков записываются преимущественно в виде уравнений, определяющих изменение концентрации вещества в потоке.

Далее будут рассмотрены экспериментальные методы исследования структуры потоков в реальных аппаратах, наиболее распространенные математические модели структуры потоков и методы определения параметров моделей.

§ 3.1. 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.

Основным требованием, предъявляемым к индикатору, является условие поведения частиц индикатора в аппарате подобно поведению частиц потока. С этой точки зрения лучшими индикаторами являются изотопы, так как они мало различаются с основным потоком по свойствам. На практике часто применяют индикаторы, которые не вступают во взаимодействие с основным потоком и могут быть легко замерены. К таким индикаторам относятся растворы солей. 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*. Последний сигнал на практике обычно имеет форму синусоиды.

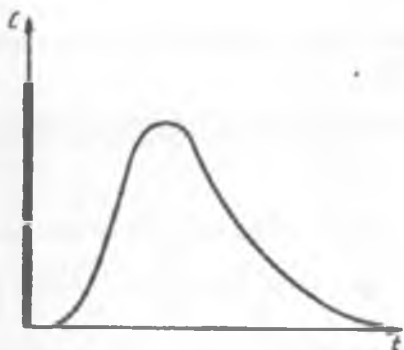


Рис. 3.1. Типичная функция отклика системы на импульсное возмущение

Импульсный метод. В соответствии с этим методом в поток на входе его в аппарат практически мгновенно, в виде дельта-функции, вводят определенное количество индикатора.

Допустим, что в поток на входе его в аппарат произвольной сложности ввели практически мгновенно индикатор и определили функцию отклика на это возмущение, изображенную на рис. 3.1. Обозначим объем аппарата через V и объемную скорость потока — через v .

Количество индикатора, время пребывания которого в аппарате изменяется от t до $t + dt$, составляет

$$dg = vC_2(t) dt. \quad (3.1)$$

Отношение dg ко всему количеству индикатора g выражает долю индикатора, вышедшего из аппарата за время от t до $t + dt$:

$$d\rho = \frac{dg}{g} = \frac{vC_2(t) dt}{g}. \quad (3.2)$$

Так как поведение индикатора в аппарате идентично поведению основного потока, то выражение (3.1) представляет собой долю потока, время пребывания которого изменяется от t до $t + dt$.

Введем безразмерную концентрацию $C(\theta)$ по формуле:

$$C(\theta) = \frac{C_2(t)}{C_0}, \quad (3.3)$$

где C_0 — начальная концентрация в потоке:

$$C_0 = \frac{g}{V}. \quad (3.4)$$

Одновременно введем безразмерное время θ по формуле

$$\theta = \frac{t}{\bar{t}}, \quad (3.5)$$

где $\bar{t}$ — среднее время пребывания частиц потока в аппарате:

$$\bar{t} = \frac{V}{v}. \quad (3.6)$$

Теперь уравнение (3.2) можно привести к виду

$$\begin{aligned} d\rho &= \frac{v C_2(t) dt}{g} = v \frac{C_0^2 C_2(t)}{C_0^2} \cdot \frac{1}{g} \cdot \frac{\bar{t} dt}{\bar{t}} = \\ &= \frac{v C_0^2 \bar{t}}{g} C(\theta) d\theta = \frac{v C_0^2 \frac{V}{v}}{g} C(\theta) d\theta = C(\theta) d\theta. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Общее количество введенного индикатора определяется выражением

$$g = v \int_0^{\infty} C_2(t) dt. \quad (3.8)$$

Тогда из уравнений (3.2), (3.7) следует

$$C(\theta) = \frac{v C_2(t) dt}{g \cdot d\theta} = \frac{v C_2(t) \bar{t}}{g} = \frac{C_2(t)}{\int_0^{\infty} C_2(t) dt} \bar{t} = C(t) \bar{t}, \quad (3.9)$$

где выражение

$$C(t) = \frac{C_2(t)}{\int_0^{\infty} C_2(t) dt} \quad (3.10)$$

задает нормированную C -кривую.

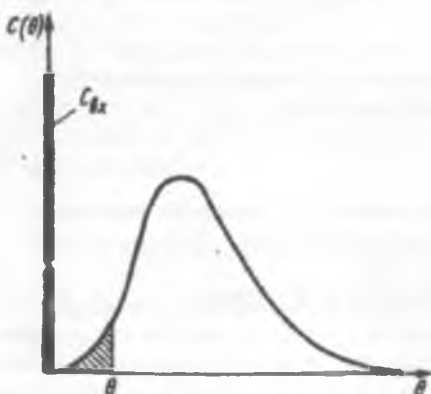


Рис. 3.2. Типичная C -кривая

Построим экспериментальную кривую в координатах $C(\theta)$, θ (рис. 3.2). Такая кривая называется C -кривой. Заштрихованная площадь под ней равна

$$\int_0^{\theta} C(\theta) d\theta \quad (3.11)$$

и означает долю потока, время пребывания которого в аппарате изменится от 0 до θ . Естественно, что

$$\int_0^{\infty} C(\theta) d\theta = 1. \quad (3.12)$$

Таким образом, C -кривая является характеристикой

распределения элементов потока по времени их пребывания в аппарате.

Среднее время пребывания потока в аппарате есть

$$\bar{t} = \int_0^{\infty} t d\rho. \quad (3.13)$$

Поставим в это выражение значение $d\rho$ из уравнения (3.2) и воспользуемся тем, что $g = v \int_0^{\infty} C_2(t) dt$. Тогда получим

$$\bar{t} = \frac{v \int_0^{\infty} t C_2(t) dt}{v \int_0^{\infty} C_2(t) dt} = \frac{\int_0^{\infty} t C_2(t) dt}{\int_0^{\infty} C_2(t) dt}. \quad (3.14)$$

Пример 1. При исследовании гидродинамики потоков в аппарате использовался импульсный метод исследования. В результате нанесения импульсного возмущения (импульсный ввод индикатора) были получены следующие значения концентрации индикатора на выходе из аппарата (табл. 3.1).

Таблица 3.1

Время, мин	Концентрация индикатора на выходе из аппарата						
	0	5	10	15	20	25	30
Концентрация индикатора, г/м ³ жидкости	0	3	5	5	4	2	1

Построить С-кривую распределения.

Решение. Для определения функции $C(\theta)$ предварительно найдем значения $C(t)$ в уравнении (3.9). Для этого вычислим сумму значений $\sum_i C_i^2 \Delta t$, полагая интервал времени отбора проб $\Delta t = 5$ мин:

$$\int_0^{\infty} C_2(t) dt \approx \sum_i C_i^2(t) \Delta t = (3 + 5 + 5 + 4 + 2 + 1) \cdot 5 = 100 \frac{\text{г} \cdot \text{мин}}{\text{м}^3}.$$

Значения нормированной функции $C(t) = C_i^2(t) / \sum_i C_i^2(t) \Delta t$ в зависимости от времени сведем в табл. 3.2.

Таблица 3.2

t, мин	Значения нормированной функции C(t)						
	0	5	10	15	20	25	30
C(t), мин ⁻¹	0	0,03	0,05	0,05	0,04	0,02	0,01

Чтобы получить функцию $C(\theta)$, приводим время к безразмерному виду θ и C — к виду $C(\theta)$. Для этого находим среднее время пребывания в аппарате из уравнения (3.14):

$$\bar{t} \approx \frac{\sum_i t_i C_i^2(t)}{\sum_i C_i^2(t)} = \frac{(5 \cdot 3) + (10 \cdot 5) + \dots + (30 \cdot 1)}{3 + 5 + 5 + 4 + 2 + 1} = \frac{300}{20} = 15 \text{ мин.}$$

Безразмерное время составит

$$\theta = \frac{t}{\bar{t}} = \frac{t}{15}.$$

Тогда, используя уравнение (3.9), имеем

$$C(\theta) = \bar{t} Q(t) \approx \frac{15 C_i^2(t)}{\sum_i C_i^2(t) \Delta t}$$

и после подстановки значений t_i , C_i^2 получим соответствующие значения $C(\theta)$ (табл. 3.3).

Таблица 3.3

θ	Значения безразмерной функции $C(\theta)$							
	0	1/3	2/3	1	4/3	5/3	2	7/3
$C(\theta)$	0	0,45	0,75	0,75	0,60	0,3	0,15	0

По этим данным строим S-кривую распределения (рис. 3.3).

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 C_0 и в дальнейшем поддерживается на этом уровне.

Кривая отклика, соответствующая сигналу ступенчатой формы, имеет вид, изображенный на рис. 3.4.

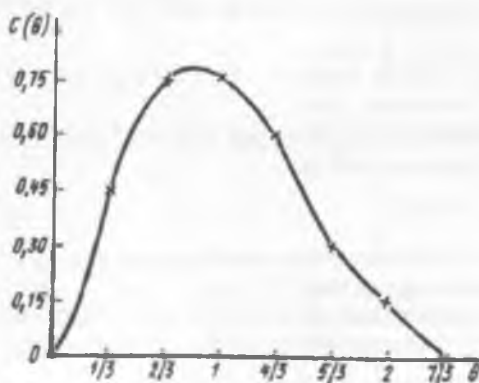


Рис. 3.3. Безразмерная S-кривая

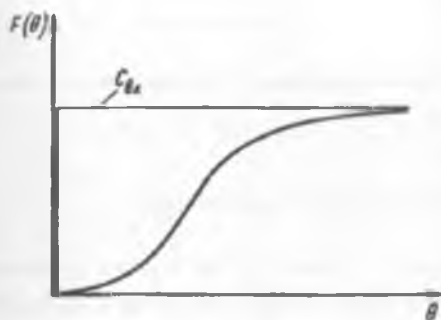


Рис. 3.4. Типичная экспериментальная F -кривая

Если время выражено в безразмерных единицах, то зависимость изменения концентрации индикатора во времени в потоке, выходящем из аппарата, называется F -кривой. Величина, равная отношению $F/F(\infty)$, во входящем потоке изменяется от 0 до 1.

Доля элементов потока, время пребывания которых в аппарате находится в пределах от θ до $\theta + d\theta$, есть:

$$dF(\theta) = C(\theta) d\theta. \quad (3.15)$$

Доля элементов потока, время пребывания которых в аппарате меньше θ , определяется следующим образом:

$$F(\theta) = \int_0^\theta C(\theta) d\theta. \quad (3.16)$$

Так как сумма всех долей жидкости в аппарате равна 1, то площадь под C -кривой равна 1 и $F(\theta) \rightarrow 1$ при $\theta \rightarrow \infty$, т.е.

$$\int_0^\infty \theta dF(\theta) = \int_0^\infty \theta C(\theta) d\theta = 1. \quad (3.17)$$

Среднее время пребывания потока в аппарате составляет:

$$\bar{t} = \frac{\int_0^\infty t C(t) dt}{\int_0^\infty C(t) dt} = \int_0^\infty t C(t) dt = \int_0^\infty t dF = - \int_0^\infty t d(1 - F). \quad (3.18)$$

Для нахождения последнего интеграла в выражении (3.18) воспользуемся интегрированием по частям:

$$\int_0^\infty t d(1 - F) = t(1 - F) \Big|_0^\infty - \int_0^\infty (1 - F) dt. \quad (3.19)$$

Первое слагаемое в уравнении (3.19) равно нулю. Тогда среднее время пребывания потока в аппарате выразится через значения функции распре-

деления элементов потока на выходе из аппарата $F(t) = F_2(t)/F_2(\infty)$ так:

$$\bar{t} = \int_0^{\infty} (1 - F) dt. \quad (3.20)$$

Введя функцию

$$I(t) = 1 - F(t), \quad (3.21)$$

среднее время пребывания можно выразить как

$$\bar{t} = \int_0^{\infty} I(t) dt. \quad (3.22)$$

Геометрически среднее время пребывания соответствует площади над кривой $F(t)$ (рис. 3.5).

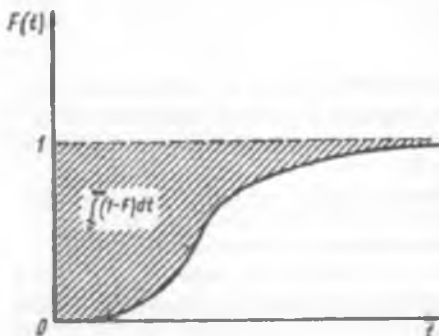


Рис. 3.5. Геометрическая интерпретация среднего времени пребывания

Метод установившегося состояния. При исследовании структуры потоков в аппарате этим методом в поток на выходе из аппарата с постоянной скоростью вводят индикатор и определяют изменение концентрации индикатора в направлении, противоположном движению потока. Частицы индикатора попадают в аппарат вследствие обратного перемешивания потока. Распределение концентраций индикатора по длине аппарата определяют в установившемся режиме.

Рассмотрим пример использования методов установившегося со-

стояния для оценки параметра диффузионной модели — коэффициента продольного перемешивания D_L . Уравнение диффузионной модели записывается в виде

$$\frac{d^2 C}{dz^2} - Pe \frac{dC}{dz} = 0, \quad (3.23)$$

где z — безразмерная координата; C — концентрация; Pe — число Пекле. Запишем граничные условия

$$C_{ax} = 0, \quad C = \frac{1}{Pe} \frac{dC}{dz} \quad \text{при } z = 0; \quad (3.24)$$

$$C = C_k \quad \text{при } z = 1. \quad (3.25)$$

Общее решение уравнения (3.23) имеет вид

$$C = A_1 + A_2 e^{Pe z}, \quad (3.26)$$

откуда получаем

$$\frac{dC}{dz} = A_2 Pe \cdot e^{Pe z}. \quad (3.27)$$

Используя граничное условие при $z = 0$, найдем значение A_1 :

$$A_1 + A_2 e^0 = \frac{1}{Pe} \cdot A_2 Pe \cdot e^0; \quad A_1 = 0. \quad (3.28)$$

Из условия при $z = 1$ имеем

$$C_k = A_2 e^{Pe}; \quad A_2 = C_k e^{-Pe}. \quad (3.29)$$

Поэтому решение уравнения диффузионной модели в рассматриваемом случае таково:

$$C = C_k e^{Pe(z-1)}. \quad (3.30)$$

Определив концентрацию индикатора в каком-либо сечении аппарата, можно определить Pe и, следовательно, $D_l = \frac{uL}{Pe}$. Замерив концентрацию

в нескольких сечениях аппарата, мы получим данные, которые можно использовать для проверки адекватности модели. Если коэффициент продольного перемешивания в потоке постоянен по длине аппарата, то значения Pe , полученные в различных точках, должны совпадать.

Метод синусоидального 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. Синусоидальное возмущение на входе определяется амплитудой A_0 и частотой $\omega = 2\pi/T$ (рад/с), где T — период колебаний. У выходной синусоиды изменяется амплитуда и происходит фазовый сдвиг φ (рис. 3.6).

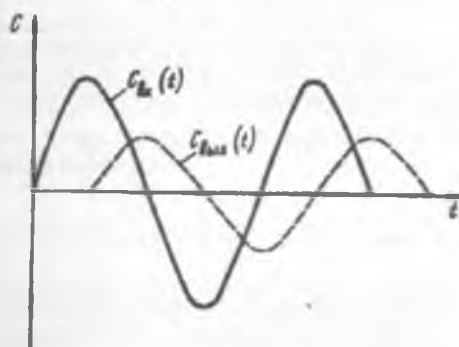


Рис. 3.6. Вид входного и выходного сигналов при синусоидальной подпитке трассера

Величина φ и изменение амплитуды для одного и того же объекта являются функциями частоты возмущающего сигнала. В результате сопоставления входной и выходной синусоид получают амплитудно-частотную и фазочастотную характеристики (рис. 3.7). Отношение амплитуд называют коэффициентом усиления $\Delta(\omega)$.

Рассмотрим определение коэффициента продольного перемешивания D_l диффузионной модели [см. ниже формулу (3.87)] при подаче на вход синусоидального сигнала. Граничные условия выражаются в виде

$$C(t, 0) = C_0 + A_0 \sin \omega t, \quad (3.31)$$

$$C(t, \infty) = C_0. \quad (3.32)$$

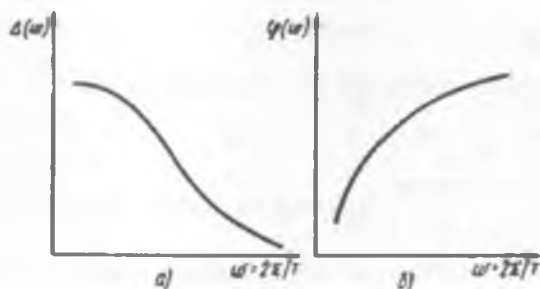


Рис. 3.7. Амплитудно-частотная (а) и фазочастотная (б) характеристики отклика системы

где C_0 — средняя концентрация индикатора; A_0 — амплитуда колебаний при $z = 0$ (на входе в аппарат).

Используя преобразование Лапласа уравнения диффузионной модели и учитывая граничные условия (3.31), (3.32), можно получить выражение для концентрации индикатора на выходе из аппарата:

$$C(t, l) = C_0 + A_0 e^{-B} \sin(\omega t - \varphi), \quad (3.33)$$

где

$$B = \ln \frac{A_0}{A_l} = \frac{ul}{2D_l} \left\{ \sqrt{1 + \left(\frac{4\omega D_l}{u^2} \right)^2} \cos \left[\frac{\lg^{-1} \left(\frac{4\omega D_l}{u^2} \right)}{2} \right] \right\} - 1 \quad (3.34)$$

l — длина аппарата; A_l — амплитуда колебаний на выходе из аппарата.

Разлагая подкоренное выражение и тригонометрическую функцию в ряд и пренебрегая членами высшего порядка, можно привести уравнение (3.34) к виду

$$B = \frac{l\omega^2 D_l}{u^3} - \frac{sl\omega^2 D_l^3}{u^7}. \quad (3.35)$$

Пренебрегая вторым членом уравнения (3.35), получаем

$$B = \ln \frac{A_0}{A_l} = \frac{l\omega^2 D_l}{u^3}. \quad (3.36)$$

Уравнение, определяющее сдвиг фаз, имеет вид

$$\varphi = \frac{ul}{2D_l} \sqrt{\sqrt{\frac{1}{4} + \left(\frac{2D_l \omega}{u^2} \right)^2} - \frac{1}{2}}. \quad (3.37)$$

После разложения в ряд и отбрасывания членов высшего порядка последнее уравнение упрощается:

$$\varphi = \frac{\omega L}{u}. \quad (3.38)$$

Теперь по экспериментальным значениям сдвига фаз φ и отношения амплитуд A_0/A_1 нетрудно по уравнениям (3.36), (3.37) оценить величину коэффициента продольного перемешивания D_L .

§ 3.2. Основные характеристики распределения элементов потока по времени пребывания в аппарате (моменты функции распределения)

Расчет распределения времени пребывания частиц потока основан на статистическом понятии моментов и связан с распределением плотности вероятностей. Основные свойства распределения случайной величины можно описать несколькими числовыми характеристиками, которые определяют наиболее существенные особенности распределения. Такой системой характеристик являются моменты распределения случайной величины, которые систематизируются по трем признакам: по порядку β момента; по началу отсчета случайной величины; по виду случайной величины.

Порядок β момента может быть любым целым числом. Практически же рассматривают моменты нулевого, первого, второго, третьего и четвертого порядков, т.е. $\beta = 0, 1, 2, 3, 4$. В зависимости от начала отсчета случайной величины различают начальные и центральные моменты. Общий вид начальных моментов функции распределения таков:

$$M_\beta = \int_0^{\infty} t^\beta C(t) dt. \quad (3.39)$$

Каждый из моментов имеет определенный физический смысл. Нулевой момент — это площадь под кривой; первый момент — характеризует среднее значение (среднее время пребывания), или математическое ожидание случайной величины времени пребывания.

Случайные величины, отсчитываемые от математического ожидания, называются *центрированными*. Моменты центрированной величины называются *центральными*. Общий вид центральных моментов таков:

$$\mu_\beta = \int_0^{\infty} (t - \bar{t})^\beta C(t) dt. \quad (3.40)$$

Второй центральный момент характеризует рассеяние случайной величины относительно среднего времени пребывания, он называется *дисперсией* и обозначается через σ_t^2 :

$$\sigma_t^2 = \mu_2 = \int_0^{\infty} (t - \bar{t})^2 C(t) dt. \quad (3.41)$$

Третий центральный момент характеризует *асимметрию* распределения и равен

$$\mu_3 = \int_0^{\infty} (t - \bar{t})^3 C(t) dt. \quad (3.42)$$

Четвертый центральный момент определяет *островершинность* распределения

$$\mu_4 = \int_0^{\infty} (t - \bar{t})^4 C(t) dt \quad (3.43)$$

и т.д.

В силу стохастической природы движения элементов потока в аппарате их время пребывания является случайной величиной с некоторой плотностью распределения. Оценкой функции плотности распределения элементов потока по времени пребывания в аппарате может служить *C-кривая*, снимаемая на выходе аппарата при импульсном возмущении. Тогда моменты *C-кривой* являются основными характеристиками распределения элементов потока по времени пребывания, определяя тем самым структуру потока.

Рассмотрим теперь связь моментов нормированной и безразмерной *C-кривой*. Значения нормированной *C-кривой* определяются как

$$C(t) = \frac{C_2(t)}{\int_0^{\infty} C_2(t) dt} \quad (3.44)$$

Начальный момент порядка β нормированной *C-кривой* есть

$$M_{\beta}^t = \int_0^{\infty} t^{\beta} C(t) dt \quad (3.45)$$

Введя безразмерную концентрацию $C(\theta)$ и время θ и учитывая, что $C(\theta) = C(t)/\bar{t}$ и $\theta = t/\bar{t}$, после подстановки в уравнение (3.45) имеем

$$\mu_{\beta}^t = \int_0^{\infty} (\theta \bar{t})^{\beta} \frac{C(\theta)}{\bar{t}} \bar{t} d\theta = \bar{t}^{\beta} \int_0^{\infty} \theta^{\beta} C(\theta) d\theta \quad (3.46)$$

Интеграл в правой части уравнения (3.46) есть по определению начальный момент порядка β безразмерного времени пребывания M_{β}^{θ} . Отсюда получается следующее соотношение между размерным и безразмерным начальными моментами порядка β :

$$M_{\beta}^t = \bar{t}^{\beta} M_{\beta}^{\theta} \quad (3.47)$$

Аналогично, подставляя $C(t) = C(\theta)/\bar{t}$ и $t = \bar{t}\theta$ в выражение для центрального момента μ_{β}^t порядка β нормированной *C-кривой*, получаем соотношение между размерным и безразмерным центральными моментами:

$$\mu_{\beta}^t = \bar{t}^{\beta} \mu_{\beta}^{\theta} \quad (3.48)$$

Обработка экспериментальных *C-кривых* с помощью метода моментов. Пусть в результате исследования объекта получена экспериментальная *C-кривая* (рис. 3.8).

Рассмотрим вычисление начальных моментов данной *C-кривой*, используя приближенную формулу трапеций. Начальный момент нулевого

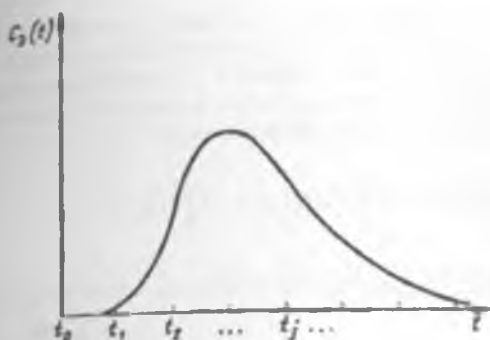


Рис. 3.8. Экспериментальная С-кривая

порядка экспериментальной С-кривой определяет площадь под кривой:

$$M_0^I = \int_0^{\infty} C_s(t) dt \approx \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{n-1} (C_j^2 + C_{j+1}^2) \Delta t, \quad (3.49)$$

где n — число точек разбиения экспериментальной С-кривой.

Начальный момент первого порядка нормированной С-кривой определяет среднее время пребывания $\bar{t}$. Учитывая определение нормированной С-кривой, имеем

$$\bar{M}_1^I = \int_0^{\infty} t C(t) dt = \bar{t} \approx \frac{\sum_{j=1}^{n-1} (t_{j+1} C_{j+1}^2 + t_j C_j^2)}{\sum_{j=1}^{n-1} (C_{j+1}^2 + C_j^2)}. \quad (3.50)$$

В общем случае начальный момент M_s^I s -го порядка нормированной С-кривой выражается формулой

$$\begin{aligned} M_s^I &= \int_0^{\infty} t^s C(t) dt = \frac{1}{(s+1)} \int_0^{\infty} C(t) d(t^{s+1}) \approx \\ &\approx \frac{1}{s+1} \frac{\sum_{j=1}^{n-1} (C_{j+1}^2 + C_j^2) (t_{j+1}^{s+1} - t_j^{s+1})}{\sum_{j=1}^{n-1} (C_{j+1}^2 + C_j^2) \Delta t}. \end{aligned} \quad (3.51)$$

Остановимся на вычислении центральных моментов. Используя определение моментов, нетрудно убедиться в справедливости следующих равенств:

$$\mu_0^I = \int_0^{\infty} (t - \bar{t})^0 C(t) dt = 1. \quad (3.52)$$

$$\mu_1^I = \int_0^{\infty} (t - \bar{t}) C(t) dt = 0. \quad (3.53)$$

Центральный момент второго порядка μ_2^t называется дисперсией S -кривой и служит характеристикой разброса распределения времени пребывания относительно среднего значения $\bar{t}$. Второй центральный момент μ_2^t можно выразить через значения второго начального момента M_2^t и среднее время пребывания $\bar{t}$ следующим образом:

$$\begin{aligned}\mu_2^t &= \int_0^{\infty} (t - \bar{t})^2 C(t) dt = \int_0^{\infty} t^2 C(t) dt - 2\bar{t} \int_0^{\infty} t C(t) dt + \\ &+ \bar{t}^2 \int_0^{\infty} C(t) dt = M_2^t - 2\bar{t}M_1 + \bar{t}^2 = M_2^t - \bar{t}^2.\end{aligned}\quad (3.54)$$

В общем случае центральный момент s -го порядка нормированной S -кривой определяется равенством

$$\begin{aligned}\mu_s^t &= \int_0^{\infty} (t - \bar{t})^s C(t) dt = \frac{1}{s+1} \int_0^{\infty} C(t) d(t - \bar{t})^{s+1} \approx \\ &\approx \frac{1}{s+1} \frac{\sum_{j=1}^{n-1} (C_{j+1}^2 + C_j^2) [(t - \bar{t})_{j+1}^{s+1} - (t - \bar{t})_j^{s+1}]}{\sum_{j=1}^{n-1} (C_{j+1}^2 + C_j^2) \Delta t}.\end{aligned}\quad (3.55)$$

В приложении 1 приведена программа MOMENT обработки экспериментальных S -кривых с помощью метода моментов.

Обработка экспериментальных F -кривых. Если S -кривая служит оценкой функции плотности распределения элементов потока по времени пребывания, то F -кривая (отклик системы на ступенчатое возмущение) является оценкой функции распределения.

На практике удобно перейти от экспериментальной F -кривой $F_s(t)$ к нормированной $F(t)$, определяемой как

$$F(t) = F_s(t)/F(\infty). \quad (3.56)$$

Нулевой начальный момент нормированной F -кривой определяется формулой

$$M_0^F = \int_0^{\infty} C(t) dt = F(\infty) = 1. \quad (3.57)$$

Запишем выражения для моментов первого, второго, ..., s -го порядков:

$$\begin{aligned}M_1^F &= \int_0^{\infty} t C(t) dt = \int_0^{\infty} t dF = - \int_0^{\infty} t d(1 - F) = \int_0^{\infty} (1 - F) dt \approx \\ &\approx \sum_{j=1}^{n-1} \frac{2 - F_{j+1} - F_j}{2} \Delta t,\end{aligned}\quad (3.58)$$

$$M_2^t = \int_0^{\bar{t}} t^2 C(t) dt = \int_0^{\bar{t}} t^2 dF = 2 \int_0^{\bar{t}} t (1 - F) dt \approx$$

$$\approx \sum_{j=1}^{n-1} [(t_{j+1} (1 - F_{j+1}) + t_j (1 - F_j)) \Delta t,$$

$$M_2^t = 2 \int_0^{\bar{t}} t^{j-1} (1 - F) dt = \int_0^{\bar{t}} (1 - F) dt^2 \approx \sum_{j=1}^{n-1} \frac{2 - F_{j+1} - F_j}{2} (t_{j+1}^2 - t_j^2). \quad (3.59)$$

Центральные моменты определяются следующим образом:

$$\mu_0^t = \int_0^{\bar{t}} (t - \bar{t})^0 C(t) dt = 1, \quad (3.60)$$

$$\mu_1^t = \int_0^{\bar{t}} (t - \bar{t}) C(t) dt = 0, \quad (3.61)$$

$$\mu_2^t = \int_0^{\bar{t}} (t - \bar{t})^2 C(t) dt = M_2^t - \bar{t}^2, \quad (3.62)$$

$$\begin{aligned} \mu_3^t &= \int_0^{\bar{t}} (t - \bar{t})^3 C(t) dt = 2 \int_0^{\bar{t}} (1 - F) d(t - \bar{t})^2 + (-1)^3 (\bar{t})^3 \approx \\ &\approx \sum_{j=1}^{n-1} (2 - F_{j+1} - F_j) [(t_{j+1} - \bar{t})^3 - (t_j - \bar{t})^3] + (-1)^3 (\bar{t})^3. \end{aligned} \quad (3.63)$$

Определение моментов распределения элементов потока по времени пребывания через передаточную функцию объекта. Оценка моментов функции распределения по времени пребывания для аппаратов со сложной гидродинамикой представляет собой весьма трудоемкую задачу. Часто в таких случаях удобно воспользоваться передаточной функцией аппарата по рассматриваемому каналу. В общем случае передаточную функцию можно взять как отношение преобразованного по Лапласу сигнала на выходе $\tilde{C}(p)$ к преобразованному по Лапласу сигналу на входе $\tilde{C}_{\text{вх}}$:

$$W(p) = \frac{\tilde{C}(p)}{\tilde{C}_{\text{вх}}(p)}, \quad (3.64)$$

где преобразование Лапласа определяется следующим образом:

$$L[C(t)] = \int_0^{\bar{t}} e^{-pt} C(t) dt, \quad (3.65)$$

$$p = \sigma + i\omega. \quad (3.66)$$

Для импульсной входной функции (дельта-функции $\delta(t)$), преобразование Лапласа даст

$$\tilde{C}_{\text{вх}}(p) = L[\delta(t)] = 1. \quad (3.67)$$

Тогда передаточная функция аппарата при импульсном входном возмущении есть

$$W(p) = \tilde{C}(p). \quad (3.68)$$

Рассмотрим передаточную функцию аппарата при импульсном возмущении

$$W(p) = L[C(t)] = \int_0^{\infty} e^{-pt} C(t) dt. \quad (3.69)$$

Полагая в выражении (3.69) $p=0$, получим

$$W(0) = \int_0^{\infty} C(t) dt = M_0'. \quad (3.70)$$

Итак, передаточная функция аппарата при $p=0$ равна нулевому начальному моменту от функции отклика на импульсное возмущение.

Продифференцируем передаточную функцию $W(p)$ по переменной p и рассмотрим значение производной в точке $p=0$:

$$\begin{aligned} \left. \frac{dW(p)}{dp} \right|_{p=0} &= \left[\int_0^{\infty} e^{-pt} C(t) dt \right]' \Big|_{p=0} = \int_0^{\infty} \frac{d}{dp} [e^{-pt} C(t) dt] \Big|_{p=0} = \\ &= \int_0^{\infty} -t C(t) dt = -M_1'. \end{aligned} \quad (3.71)$$

Таким образом, получаем

$$W_p'(0) = -M_1'. \quad (3.72)$$

Аналогично рассмотрим производную второго порядка по p от передаточной функции $W(p)$:

$$\left. \frac{d^2 W(p)}{dp^2} \right|_{p=0} = \int_0^{\infty} t^2 C(t) dt = M_2' \quad (3.73)$$

или

$$W_p''(0) = M_2'. \quad (3.74)$$

Наконец, в общем случае для производной n -го порядка имеем

$$W_p^{(n)}(0) = (-1)^n M_n'. \quad (3.75)$$

§ 3.3. Модель идеального смешения и идеального вытеснения

Все многообразие взаимодействующих диффузионных и тепловых потоков с учетом распределения по времени пребывания можно формализовать в виде типовых математических моделей: идеального перемешивания, идеального вытеснения, диффузионной, ячеечной, циркуляционной и комбинированной. Перечисленные типовые модели отвечают следующим

требованиям: 1) отражают основные физические закономерности реального потока в рассматриваемых условиях; 2) являются достаточно простыми; 3) позволяют экспериментально или теоретически определять параметры модели; 4) дают возможность их использования для расчета конкретных процессов.

В данном параграфе будут рассмотрены модели идеального смешения и идеального вытеснения.

Модель идеального смешения соответствует аппарату, в котором поступающее в него вещество мгновенно распределяется по всему объему аппарата. Концентрация вещества в любой точке аппарата равна концентрации на выходе из него.

Уравнение модели идеального смешения записывается в виде

$$V \frac{dC}{dt} = v(C_{вх} - C), \quad (3.76)$$

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

Отклик модели идеального смешения на входное возмущение для метода вымывания (метод импульсного введения индикатора) (кривая 1 на рис. 3.9):

$$C(t) = C_{вх} e^{-t/\bar{t}}. \quad (3.77)$$

При импульсном возмущении уравнение имеет аналогичный вид, так как введенный индикатор в количестве g мгновенно распределяется по всему объему и начинается его вымывание. Начальная концентрация при этом равна $C_{вх} = g/V$. Соответственно изменение концентрации на выходе потока из аппарата описывается уравнением (3.77) (кривая 1 на рис. 3.9).

При ступенчатом введении индикатора со скачкообразным изменением концентрации в момент времени $t = 0$ от $C = 0$ до $C = C_{вх}$ функция отклика принимает вид

$$C(t) = C_{вх} (1 - e^{-t/\bar{t}}). \quad (3.78)$$

(кривая 2 на рис. 3.9).

Передаточная функция аппарата идеального смешения определяется с помощью преобразования по Лапласу исходного уравнения модели и имеет вид

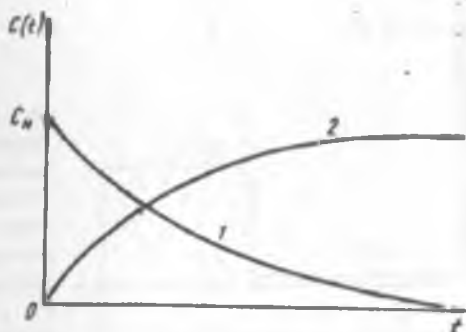


Рис. 3.9. Функции отклика для модели идеального смешения: 1 — метод вымывания (метод импульсного введения индикатора); 2 — метод ступенчатого введения индикатора

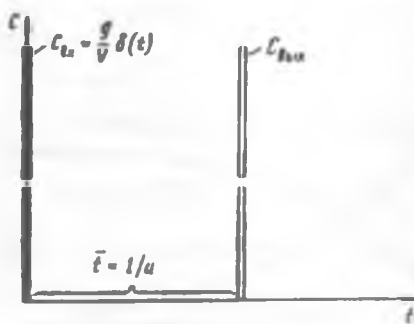


Рис. 3.10. Отклик на импульсное возмущение для модели идеального вытеснения

$$W(p) = \frac{1}{1 + \bar{t}p}. \quad (3.79)$$

Отметим, что модель идеального смешения отличается значительной простотой. Вместе с тем в ряде случаев ее применение вполне обосновано. Это в первую очередь относится к интенсивно перемешиваемым аппаратам с отражательными перегородками (аппараты с мешалками, цилиндрические аппараты со сферическим дном в условиях больших скоростей перемешивания и т. д.).

В основе модели идеального вытеснения лежит допущение о поршневом течении без перемешивания вдоль потока при равномерном распределении вещества в направлении, перпендикулярном движению. Время пребывания всех частиц в системе одинаково и равно отношению объема системы к объемному расходу жидкости.

Такой поток, например, имеет место в трубчатом аппарате при турбулентном режиме течения жидкости через него. В этом случае профиль скоростей можно считать равномерным, т.е. считать одинаковым время пребывания отдельных элементов потока.

Уравнение модели идеального вытеснения записывается в виде

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = 0, \quad (3.80)$$

где t — время, а x — координата, вдоль которой перемещается вещество со скоростью u .

Решение уравнения (3.80), удовлетворяющее начальному условию

$$C(0, x) = C_{in}(x) \quad \text{при} \quad t = 0, \quad 0 < x < l \quad (3.81)$$

и граничному условию

$$C(t, 0) = C_{in}(t) \quad \text{при} \quad x = 0, \quad t > 0; \quad (3.82)$$

есть

$$C(t, l) = \begin{cases} C_{in}(l - ut), & t < \frac{l}{u}; \\ C_{in}(t - \frac{l}{u}), & t > \frac{l}{u}. \end{cases} \quad (3.83)$$

Из решения (3.83) следует, что любое изменение концентрации на входе в аппарат идеального вытеснения появится на его выходе через время, равное среднему времени пребывания $\bar{t} = l/u$ (здесь l — длина аппарата).

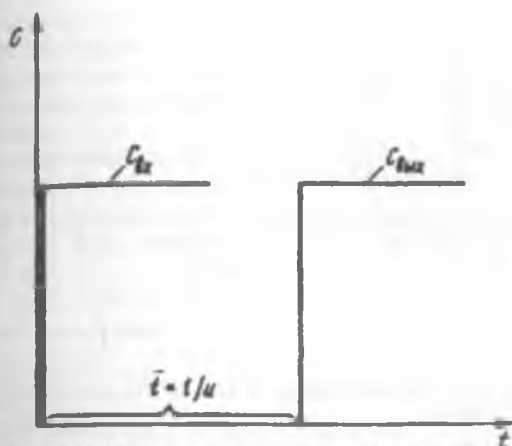


Рис. 3.11. Отклик на ступенчатое возмущение для модели идеального вытеснения

В соответствии с решением (3.83) отклики на импульсное и ступенчатое возмущения для модели идеального вытеснения изображены соответственно на рис. 3.10 и 3.11.

Передаточная функция для аппаратов идеального вытеснения имеет вид

$$W(p) = e^{-p\bar{t}}. \quad (3.84)$$

Отметим, что модели идеального вытеснения в первом приближении соответствуют процессы, протекающие в трубчатых аппаратах при большом отношении длины трубы к диаметру.

§ 3.4. Диффузионная модель

Основное уравнение однопараметрической диффузионной модели. В основе диффузионной модели лежит допущение, что структура потока описывается уравнением, аналогичным уравнению молекулярной диффузии. Параметром модели является коэффициент продольного перемешивания, называемый также коэффициентом турбулентной диффузии (или коэффициентом обратного перемешивания).

Для вывода уравнения модели составим уравнение материального баланса для элемента аппарата Δx , как показано на рис. 3.12. Приняты следующие обозначения: F — сечение аппарата, m^2 ; u — скорость потока, m/s ; t — время, s ; C — концентрация индикатора, kg/m^3 ; D_l — коэффициент продольного перемешивания, m^2/s .

В рассматриваемый элемент поступают конвективный поток uFC и поток, вызываемый турбулентной диффузией $D_l F \frac{\partial}{\partial x} (C + \frac{\partial C}{\partial x} \Delta x)$, а поки-

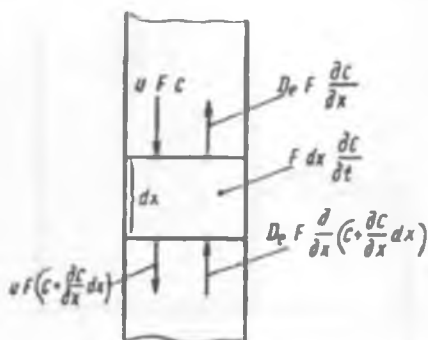


Рис. 3.12. К выводу уравнения диффузионной модели

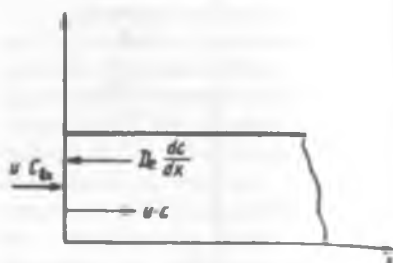


Рис. 3.13. Схема потоков у левого конца аппарата

дают рассматриваемый элемент конвективный поток $uF(C + \frac{\partial C}{\partial x} \Delta x)$ и поток, вызываемый турбулентной диффузией $D_1 F \frac{\partial C}{\partial x}$.

В соответствии с законом сохранения массы разность между входящими и выходящими потоками должна составлять накопление вещества (индикатора) в рассматриваемом элементе. Она равна $F \Delta x \frac{\partial C}{\partial t}$. Запишем теперь уравнение сохранения массы:

$$\text{Накопление} = \text{Приход вещества} - \text{Расход вещества} \quad (3.85)$$

или

$$F \Delta x \frac{\partial C}{\partial t} = u F C + D_1 F \frac{\partial}{\partial x} (C + \frac{\partial C}{\partial x} \Delta x) - u F (C + \frac{\partial C}{\partial x} \Delta x) - D_1 F \frac{\partial C}{\partial x} \quad (3.86)$$

Преобразуя последнее уравнение и переходя к пределу при $\Delta x \rightarrow 0$, получаем

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - u \frac{\partial C}{\partial x} \quad (3.87)$$

Уравнение (3.87) является основным уравнением диффузионной модели.

Остановимся на начальном и граничном условиях для уравнения (3.87). Очевидно, что должны быть заданы одно начальное и два граничных условия. В качестве начального условия обычно задается профиль концентраций по аппарату в начальный момент времени:

$$C(0, x) = C_n(x) \quad \text{при} \quad t = 0. \quad (3.88)$$

Граничные условия могут быть заданы из условия материального ба-

ланса на концах аппарата (условия по Данквертсу). Рассмотрим левый конец аппарата, в который поступает поток с некоторой средней скоростью u (рис. 3.13).

Сумма потоков вещества, подводящихся к границе $x = 0$, должна быть равна потоку вещества, отходящего от границы. Тогда получим

$$uC_{вх} + D_1 \frac{dC}{dx} = uC \quad (3.89)$$

или

$$u(C_{вх} - C) + D_1 \frac{dC}{dx} = 0. \quad (3.90)$$

Для правого конца аппарата (рис. 3.14) имеем

$$uC = uC_{вых} + D_1 \frac{dC}{dx}. \quad (3.91)$$

На практике часто принимают $C \approx C_{вых}$. С учетом этого граничное условие (3.91) примет вид

$$\frac{dC}{dx} = 0. \quad (3.92)$$

Условия (3.90), (3.92) называются *граничными условиями по Данквертсу*.

Наряду с рассмотренной однопараметрической диффузионной моделью иногда используется двухпараметрическая диффузионная модель. Отличие ее состоит в том, что перемешивание потока учитывается как в продольном, так и в радиальном направлениях. Таким образом, двухпараметрическая диффузионная модель характеризуется двумя параметрами: коэффициентом продольного D_1 и радиального D_r перемешивания. Принимается, что коэффициенты продольного и радиального перемешивания не изменяются соответственно по длине и сечению аппарата. Для случая одномерного движения потока в аппарате цилиндрической формы с постоянной по длине и сечению скоростью u уравнение двухпараметрической диффузионной модели имеет вид

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = D_1 \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{D_r}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial C}{\partial r} \right). \quad (3.93)$$

Если начальные и граничные условия заданы в виде

$$C(0, x, r) = 0 \quad \text{при } t = 0, \quad (3.94)$$

$$r = 0, \quad C(t, 0, 0) = C_0 \delta(0) \quad \text{при } x = 0, \quad (3.95)$$

$$\frac{\partial C(t, x, R)}{\partial r} = 0 \quad \text{при } r = R; \quad (3.96)$$

$$uC(t, 0, r) - D_1 \frac{\partial C(t, 0, r)}{\partial x} = 0 \quad \text{при } x = 0; \quad (3.97)$$

$$\frac{\partial C(t, l, r)}{\partial x} = 0 \quad \text{при } x = l. \quad (3.98)$$

то решение уравнения двухпараметрической диффузионной модели есть

$$C(z, \rho, \theta) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{C_0(k_0 - \frac{1}{2D_z})}{2k_0} e^{-\lambda_n^2 \theta} J_0(x_n \rho) \cdot \left[\left(\frac{1}{2D_z} - k_0 \right) z + \frac{k_0 + D_z/2}{k_0 - D_z/2} e^{(\frac{1}{2D_z} + k_0)z} \right]. \quad (3.99)$$

Здесь $z = x/l$; $\rho = r/R$; $\theta = t/\bar{t}$; $\bar{t} = l/u$; $D_z = D_1 \bar{t}/l$; J_0 — функция Бесселя первого рода нулевого порядка; x_n — корни функции Бесселя первого рода первого порядка;

корень k_0 удовлетворяет уравнению $e^k = \frac{1/2D_z + k}{1/2D_z - k}$; R — радиус аппарата.

Двухпараметрическая диффузионная модель используется для описания движения потоков в аппаратах колонного типа с небольшим отношением длины к диаметру и большой поперечной неравномерностью скоростей потоков. Ввиду сложности решения такая модель используется значительно реже однопараметрической, поэтому в дальнейшем будем рассматривать лишь однопараметрическую диффузионную модель.

Безразмерная форма записи диффузионной модели. Введем безразмерные переменные

$$z = x/l, \quad (3.100)$$

$$\theta = t/\bar{t} \quad (3.101)$$

и представим уравнение (3.87) в виде

$$\frac{\bar{t}}{l} \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{u}{l} \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{D_1}{l^2} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}. \quad (3.102)$$

С учетом введенных переменных получаем

$$\frac{1}{\bar{t}} \frac{\partial C}{\partial \theta} + \frac{u}{l} \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{D_1}{l^2} \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \quad (3.103)$$

или

$$\frac{ul}{D_1} \frac{\partial C}{\partial \theta} + \frac{ul}{D_1} \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}. \quad (3.104)$$

Множитель (ul/D_1) в левой части уравнения (3.104) представляет собой безразмерное число Пекле (Pe). Тогда последнее уравнение можно переписать в виде

$$Pe \frac{\partial C}{\partial \theta} + Pe \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}. \quad (3.105)$$

Приведем к безразмерной форме граничные условия (3.91), (3.92). Получаем

$$(C_{вх} - C) + \frac{1}{Pe} \frac{dC}{dz} = 0 \quad \text{при } z = 0, \quad (3.106)$$

$$\frac{dC}{dz} = 0 \quad \text{при } z = 1. \quad (3.107)$$

Функция отклика диффузионной модели на импульсное и ступенчатое возмущения. Рассмотрим сначала функцию отклика на импульсное

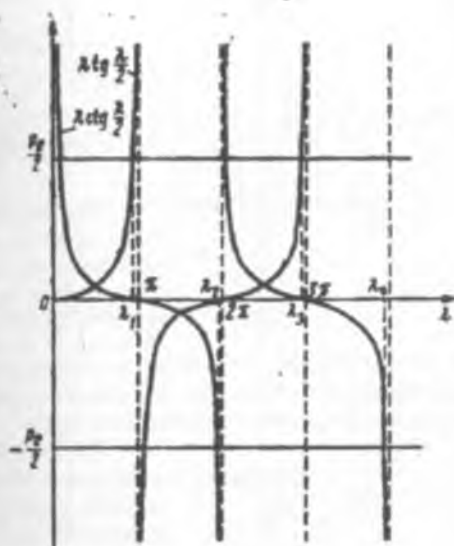


Рис. 3.15. Графическая интерпретация корней трансцендентных уравнений (3.109), (3.110)

возмущение. В зависимости от используемых граничных условий получены решения для бесконечного, полубесконечного аппаратов и аппарата конечной длины. В последнем случае решение представляется в виде бесконечного медленно сходящегося ряда:

$$C(\theta) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{2\lambda_i^2 \exp\left(-\frac{Pe}{2} - \frac{Pe}{4} \theta - \lambda_i^2 \frac{4\theta}{Pe}\right)}{\left(1 + \frac{Pe}{2}\right)\lambda_i \sin 2\lambda_i - \left[\frac{Pe}{4} + \left(\frac{Pe}{4}\right)^2 - \lambda_i^2\right] \cos 2\lambda_i}, \quad (3.108)$$

где λ_i — корни трансцендентных уравнений

$$\frac{\lambda_i}{2} \operatorname{tg} \frac{\lambda_i}{2} = \frac{Pe}{4} \quad (i = 1, 3, 5, \dots); \quad (3.109)$$

$$\frac{\lambda_i}{2} \operatorname{ctg} \frac{\lambda_i}{2} = -\frac{Pe}{4} \quad (i = 2, 4, 6, \dots) \quad (3.110)$$

(графики этих уравнений изображены на рис. 3.15).

Решение (3.108) дает удовлетворительные результаты в области $\theta > 0,01$ и $Pe < 10$. Вне указанных пределов необходимо пользоваться аппроксимационным решением (рис. 3.16 и 3.17).

Рассмотрим теперь функцию отклика на ступенчатое возмущение. Для аппарата конечных размеров с граничными условиями по Дамкверту функция отклика имеет вид

$$F(\theta) = 1 - 2\text{Re} \exp\left(\frac{\text{Pe}}{2}\right) \sum_{i=1}^{\infty} \frac{(-1)^{i+1} \lambda_i^2 \exp\left(-\frac{\lambda_i^2 + \frac{\text{Pe}^2}{4}}{\text{Pe}} \theta\right)}{\left(\lambda_i^2 + \frac{\text{Pe}^2}{4}\right) \left(\lambda_i^2 + \frac{\text{Pe}^2}{4} + \text{Pe}\right)}. \quad (3.111)$$

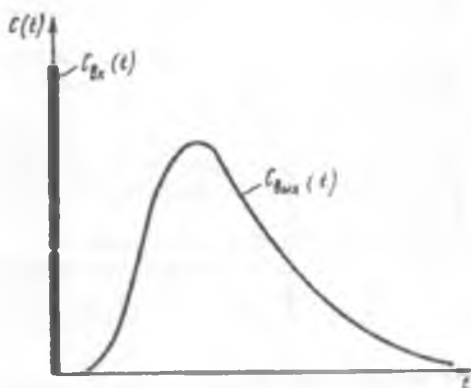


Рис. 3.16. Отклик на импульсное возмущение для диффузионной модели

Так же как и в предыдущем случае, решение (3.111) представляет собой медленно сходящийся ряд. Удовлетворительное решение может быть достигнуто в области $\theta > 0,01$ и $\text{Pe} < 10$. Величины λ_i являются корнями уравнений (3.109), (3.110).

Передаточная функция диффузионной модели. Для получения передаточной функции диффузионной модели применим преобразование Лапласа к исходной модели (уравнения (3.105), (3.106), (3.107)). При этом будем предполагать, что имеет место импульсное возмущение. Имеем

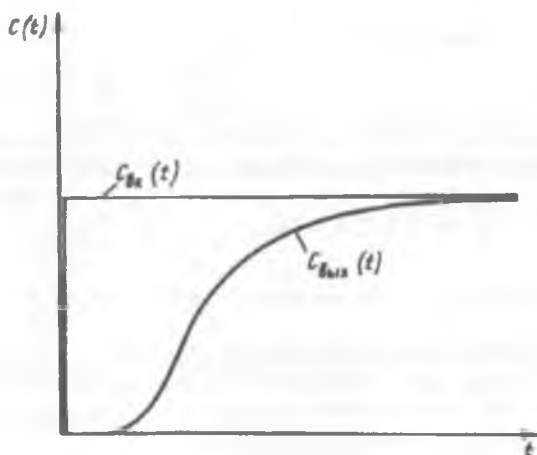


Рис. 3.17. Отклик на ступенчатое возмущение для диффузионной модели

$$\text{Pe} p \tilde{C} + \text{Pe} \frac{d\tilde{C}}{dz} = \frac{d^2 \tilde{C}}{dz^2} \quad (3.112)$$

или

$$\frac{d^2 \tilde{C}}{dz^2} - \text{Pe} \frac{d\tilde{C}}{dz} - \text{Pe} p \tilde{C} = 0. \quad (3.113)$$

Граничные условия запишутся соответственно в виде

$$1 - \tilde{C} + \frac{1}{\text{Pe}} \frac{d\tilde{C}}{dz} = 0 \quad \text{при } z = 0, \quad (3.114)$$

$$\frac{d\tilde{C}}{dz} = 0 \quad \text{при } z = 1. \quad (3.115)$$

Свернутое по времени уравнение диффузионной модели (3.113) представляет собой линейное однородное дифференциальное уравнение второго порядка. Решим его относительно искомой преобразованной по Лапласу концентрации $\tilde{C}(p)$.

Запишем характеристическое уравнение

$$k^2 - \text{Pe} k - \text{Pe} p = 0. \quad (3.116)$$

Корни характеристического уравнения таковы:

$$k_{1,2} = \frac{\text{Pe}}{2} \pm \sqrt{\frac{\text{Pe}^2}{4} + \text{Pe} p}. \quad (3.117)$$

Отсюда, обозначая

$$\beta = \frac{\text{Pe}}{2}, \quad (3.118)$$

$$\alpha = \sqrt{\frac{\text{Pe}^2}{4} + \text{Pe} p}, \quad (3.119)$$

получаем

$$k_1 = \beta + \alpha, \quad (3.120)$$

$$k_2 = \beta - \alpha. \quad (3.121)$$

Следовательно, общее решение уравнения (3.113) имеет вид

$$\tilde{C} = A_1 e^{k_1 z} + A_2 e^{k_2 z} = A_1 e^{(\beta + \alpha)z} + A_2 e^{(\beta - \alpha)z}. \quad (3.122)$$

Определим константы A_1 и A_2 , используя граничные условия (3.114), (3.115). Предварительно найдем значение производной $\frac{d\tilde{C}}{dz}$:

$$\frac{d\tilde{C}}{dz} = A_1 (\beta + \alpha) e^{(\beta + \alpha)z} + A_2 (\beta - \alpha) e^{(\beta - \alpha)z}. \quad (3.123)$$

Из первого граничного условия при $z = 0$ имеем

$$1 - A_1 - A_2 + \frac{1}{\text{Pe}} (A_1 (\beta + \alpha) + A_2 (\beta - \alpha)) = 0, \quad (3.124)$$

откуда, полагая $a = \alpha/\beta$, получим

$$1 - A_1 - A_2 + A_1 \frac{1}{2} (1 + a) + A_2 \frac{1}{2} (1 - a) = 0. \quad (3.125)$$

Соответственно из второго граничного условия при $x = 1$ следует

$$A_1 (1 + a) e^{(\beta + \alpha)} + A_2 (1 - a) e^{(\beta - \alpha)} = 0. \quad (3.126)$$

Выразим константу A_1 из уравнения (3.126):

$$A_1 = \frac{(a - 1) e^{-a}}{(a + 1) e^a} A_2. \quad (3.127)$$

Подставив ее в уравнение (3.125), получаем

$$1 + \frac{1}{2} \frac{(a - 1)^2}{(a + 1)} e^{-2a} A_2 - A_2 \frac{1}{2} (a + 1) = 0. \quad (3.128)$$

Отсюда

$$A_2 = \frac{2(a + 1) e^a}{(a + 1)^2 e^a - (a - 1)^2 e^{-a}}. \quad (3.129)$$

Подставляя (3.129) в (3.127), находим

$$A_1 = \frac{2(a - 1) e^{-a}}{(a + 1)^2 e^a - (a - 1)^2 e^{-a}}. \quad (3.130)$$

Теперь можно записать решение уравнения (3.113):

$$\tilde{C}(p) = \frac{4ae^{\beta}}{(a + 1)^2 e^a - (a - 1)^2 e^{-a}}. \quad (3.131)$$

Для импульсного возмущения выражение передаточной функции $W(p)$ совпадает с решением $\tilde{C}(p)$. Тогда получаем следующий вид для передаточной функции диффузионной модели:

$$W(p) = \frac{4ae^{\beta}}{(a + 1)^2 e^a - (a - 1)^2 e^{-a}}. \quad (3.132)$$

Оценка параметра Pe диффузионной модели. Рассмотрим задачу определения числа Pe по экспериментальным функциям отклика системы на типовое возмущение по составу потока. Методы определения можно разделить на две группы: 1) методы, использующие решение уравнения (3.105); 2) методы, в основе которых лежат уравнения связи между статистическими параметрами функции отклика и параметрами модели.

Для определения Pe с помощью методов первой группы необходимо иметь решение уравнения (3.105). Такие решения имеются (см. уравнения (3.108)–(3.110)). Следует отметить, что эти решения имеют вид рядов, причем медленно сходящегося, чем обусловлена трудность практического использования этих решений. Далее, используя аналитическое решение, подбирают такое значение Pe , которое удовлетворяло бы критерию

$$\sum (C_i^e - C_i^p)^2 = \min, \quad (3.133)$$

где C_i^e и C_i^p — соответственно экспериментальное и рассчитанное по уравнению (3.105) значение концентрации.

Наибольшее распространение получили методы второй группы, к рассмотрению которых мы и переходим.

Выведем уравнения связи между параметрами диффузионной модели и моментными характеристиками экспериментальных кривых распределения времени пребывания элементов потока в аппарате.

Пусть через закрытый аппарат протекает поток, в котором имеет место продольное перемешивание. Испытания проводятся методом импульсного возмущения. Скорость потока (линейная) равна u (м/с); площадь поперечного сечения аппарата равна F (м²); длина аппарата равна l (м). Импульсное возмущение подается на вход аппарата, а отклик определяется на выходе из аппарата (соответственно точки $x = 0$ и $x = l$). Количество индикатора, вводимого в аппарат, равно g .

Запишем уравнение диффузионной модели:

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \frac{u}{D_l} \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{1}{D_l} \frac{\partial C}{\partial t}. \quad (3.134)$$

Граничные условия при $x = 0$ определим из уравнения материального баланса для этого сечения:

$$FuC_{вх} + g\delta(t) + FD_l \frac{dC}{dx} = FuC. \quad (3.135)$$

Так как концентрация индикатора во входящем потоке $C_{вх} = 0$, то первый член в левой части уравнения (3.135) также равен нулю, тогда

$$uC - D_l \frac{dC}{dx} = \frac{g}{F} \delta(t). \quad (3.136)$$

При $x = l$ уравнение материального баланса имеет вид

$$uCF = uC_{вых}F + FD_l \frac{dC}{dx}. \quad (3.137)$$

Так как при $x = l$ имеем $C = C_{вых}$, то

$$D_l \frac{dC}{dx} = 0 \text{ и } \frac{dC}{dx} = 0. \quad (3.138)$$

Преобразуем уравнение диффузионной модели, для чего умножим обе части уравнения (3.134) на t и проинтегрируем по t от 0 до ∞ :

$$\int_0^\infty t \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} dt - \frac{u}{D_l} \int_0^\infty t \frac{\partial C}{\partial x} dt = \frac{1}{D_l} \int_0^\infty t \frac{\partial C}{\partial t} dt. \quad (3.139)$$

Обозначим $\int_0^\infty t C dt$ через J . Величина $\int_0^\infty t^n C dt$ является начальным моментом n -го порядка. Тогда уравнение (3.139) примет вид

$$\frac{d^2 J}{dx^2} - \frac{u}{D_l} \frac{dJ}{dx} = -\frac{1}{D_l} J. \quad (3.140)$$

Действительно,

$$\int_0^l t \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} dt = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \int_0^l t C dx = \frac{\partial^2 J}{\partial x^2}, \quad (3.141)$$

$$\frac{u}{D_1} \int_0^l t \frac{\partial C}{\partial x} dx = \frac{u}{D_1} \frac{\partial}{\partial x} \int_0^l t C dx = \frac{u}{D_1} \frac{\partial J}{\partial x}, \quad (3.142)$$

$$\int_0^l t \frac{\partial C}{\partial t} dt = \int_0^l t dC = L \quad (3.143)$$

Интегрируя по частям, получим

$$\int_0^l t dC = tC \Big|_0^l - \int_0^l C dt = \int_0^l C dt, \quad (3.144)$$

так как концентрация индикатора равна нулю в конечный момент времени.

Аналогично преобразуем граничные условия (3.136) и (3.138).

При $x = 0$ имеем

$$\int_0^l t C dt - \frac{D_1}{u} \int_0^l t \frac{dC}{dx} dt = \frac{s}{Fu} \int_0^l t \delta(t) dt, \quad (3.145)$$

где $\int_0^l t \delta(t) dt$ в силу свойства δ -функции равен $\int f(t)\delta(t)dt = f(t)$. Так как

возмущение происходит в момент времени $t = 0$, то в этой точке $f(t) = 0$.

Поэтому

$$J - \frac{D_1}{u} \frac{dJ}{dx} = 0. \quad (3.146)$$

При $x = l$ имеем

$$\frac{dJ}{dx} = 0. \quad (3.147)$$

Найдем теперь решение уравнения (3.140). Для этого предварительно понизим его порядок. Положим

$$z = \frac{dJ}{dx}. \quad (3.148)$$

Тогда уравнение (3.140) примет вид

$$\frac{dz}{dx} - \frac{u}{D_1} z = - \frac{J}{D_1}. \quad (3.149)$$

Так как уравнение (3.149) неоднородное, то сначала найдем решение соответствующего однородного уравнения

$$\frac{dz}{dx} - \frac{u}{D_1} z = 0. \quad (3.150)$$

Применяя метод разделения переменных, имеем

$$\frac{dz}{z} = \frac{u}{D_1} dx \quad (3.151)$$

или

$$\int \frac{dz}{z} = \int \frac{u}{D_1} dx + \ln C_1, \quad (3.152)$$

$$\ln z = \frac{u}{D_1} x + \ln C_1. \quad (3.153)$$

Отсюда

$$z = C_1 e^{\frac{u}{D_1} x}. \quad (3.154)$$

Будем теперь рассматривать C_1 как переменную $C_1(x)$. Подставим найденное решение однородного уравнения (3.150) в исходное уравнение (3.149), получим

$$C_1(x) e^{\frac{u}{D_1} x} \frac{u}{D_1} + C_1'(x) e^{\frac{u}{D_1} x} - \frac{u}{D_1} C_1(x) e^{\frac{u}{D_1} x} = -\frac{I}{D_1}, \quad (3.155)$$

$$[C_1(x)]'_x e^{\frac{u}{D_1} x} = -\frac{I}{D_1}. \quad (3.156)$$

Решаем уравнение (3.156) относительно искомой функции $C_1(x)$:

$$\frac{dC_1(x)}{dx} = -\frac{I}{D_1} e^{-\frac{u}{D_1} x}; \quad (3.157)$$

$$\int dC_1(x) = \int -\frac{I}{D_1} e^{-\frac{u}{D_1} x} dx + C, \quad (3.158)$$

$$C_1(x) = \frac{I}{D_1} e^{-\frac{u}{D_1} x} + C. \quad (3.159)$$

Теперь общее решение (3.154) неоднородного уравнения (3.149) примет вид

$$z = \left(\frac{I}{u} e^{-\frac{u}{D_1} x} + C \right) e^{\frac{u}{D_1} x}. \quad (3.160)$$

Запишем решение (3.160) для искомой функции J . Так как

$$dJ = z dx, \quad (3.161)$$

$$\int dJ = \int \left(\frac{I}{u} + C e^{\frac{u}{D_1} x} \right) dx + C_2, \quad (3.162)$$

$$J = \frac{I}{u} x + C \frac{D_1}{u} e^{\frac{u}{D_1} x} + C_2. \quad (3.163)$$

Используя граничные условия, определим константы C и C_2 в решении (3.163). Имеем

$$J - \frac{D_l}{u} \frac{dJ}{dx} = 0 \text{ при } x=0, \quad (3.164)$$

т.е.

$$C \frac{D_l}{u} + C_2 - \frac{D_l}{u} \left(\frac{I}{u} + C \right) = 0, \quad (3.165)$$

откуда

$$C_2 = \frac{D_l I}{u^2}. \quad (3.166)$$

Аналогично, из условия

$$\frac{dJ}{dx} = 0 \text{ при } x=l, \quad (3.167)$$

получим

$$\frac{I}{u} + C e^{-\frac{u}{D_l} l} = 0, \quad (3.168)$$

откуда находим

$$C = -\frac{I}{u} e^{\frac{u}{D_l} l}. \quad (3.169)$$

Тогда решение (3.163) примет следующий вид:

$$\begin{aligned} J &= \frac{I}{u} x + \left(-\frac{I}{u} \right) e^{-\frac{u}{D_l} l} \frac{D_l}{u} e^{\frac{u}{D_l} x} + \frac{D_l I}{u^2} = \\ &= \frac{I}{u} x + \frac{D_l I}{u^2} - \frac{D_l I}{u^2} e^{\frac{u}{D_l} (x-l)} \end{aligned} \quad (3.170)$$

При $x=l$ получим

$$J = \frac{I}{u} l + \frac{D_l I}{u^2} - \frac{D_l I}{u^2} e^0 = \frac{I}{u} l. \quad (3.171)$$

Отсюда

$$\frac{J}{I} = \frac{\int_0^l C dt}{\int_0^l C dt} = \frac{l}{u} = \bar{t}. \quad (3.172)$$

Если экспериментальная функция отклика определяется только на выходе потока из аппарата, то по уравнению (3.172) можно определить среднее время пребывания потока в аппарате, и если, кроме того, известна длина аппарата — скорость потока в нем. Если же определить кривые отклика в двух точках, на выходе и в произвольной точке x , то, используя уравнения (3.170), (3.172), можно определить u и D_l . Наконец, если функция отклика определяется в нескольких сечениях аппарата, то уравнение (3.170) можно использовать для проверки адекватности модели. Мо-

дана адекватна, когда экспериментальное распределение значений $J = \int_0^l t C dt$ соответствует уравнению (3.170) для одного из статистических критериев.

Величину D_l или Pe возможно определить и по одной экспериментальной кривой, полученной на выходе потока из аппарата. Найдем уравнение связи между моментом второго порядка от функции отклика и параметрами модели. Для этого умножим все члены уравнений диффузионной модели на граничных условий на t^2 и проинтегрируем по t от 0 до ∞ .

Тогда уравнение диффузионной модели примет вид

$$\frac{d^2 J_0}{dx^2} - \frac{u}{D_l} \frac{dJ_0}{dx} = -\frac{2}{D_l} J, \quad (3.173)$$

где

$$J_0 = \int_0^{\infty} t^2 C dt. \quad (3.174)$$

Правая часть уравнения (3.173) получена следующим образом:

$$\int_0^{\infty} t^2 \frac{\partial C}{\partial t} dt = \int_0^{\infty} t^2 dC = t^2 C \Big|_0^{\infty} - \int_0^{\infty} 2t C dt = -2J. \quad (3.175)$$

Подставляя найденное ранее выражение для J , получаем

$$\frac{d^2 J_0}{dx^2} - \frac{u}{D_l} \frac{dJ_0}{dx} = -\frac{2D_l l}{u^2 D_l} - \frac{2D_l l}{D_l u^2} e^{\frac{u}{D_l}(x-l)} + \frac{2l}{D_l u} x. \quad (3.176)$$

Аналогично запишем граничные условия:

$$J_0 - \frac{D_l}{u} \frac{dJ_0}{dx} = 0 \quad \text{при } x=0, \quad (3.177)$$

$$\frac{dJ_0}{dx} = 0 \quad \text{при } x=l. \quad (3.178)$$

Решим уравнение (3.176) относительно искомого момента J_0 . Для этого предварительно понизим его порядок, вводя следующее обозначение:

$$\frac{dJ_0}{dx} = z. \quad (3.179)$$

Тогда уравнение (3.176) примет вид

$$\frac{dz}{dx} - \frac{u}{D_l} z = -\frac{2D_l l}{u^2 D_l} + \frac{2D_l l}{u^2 D_l} e^{\frac{u}{D_l}(x-l)} - \frac{2l}{u D_l} x. \quad (3.180)$$

Уравнение (3.180) представляет собой дифференциальное уравнение первого порядка. Сначала найдем решение однородного уравнения

$$\frac{dz}{dx} - \frac{u}{D_l} z = 0. \quad (3.181)$$

Решая это уравнение методом разделения переменных, получим

$$z' = C_1(x) e^{\frac{u}{D_1} x} \quad (3.182)$$

Найдем теперь решение неоднородного уравнения (3.180). Будем рассматривать константу C_1 как функцию от x . Подставив затем решение (3.182) в неоднородное уравнение (3.180), имеем

$$\begin{aligned} [C_1(x)]'_x e^{\frac{u}{D_1} x} + C_1(x) \frac{u}{D_1} e^{\frac{u}{D_1} x} - \frac{u}{D_1} C_1(x) e^{\frac{u}{D_1} x} = \\ = \frac{2f}{u^2} + \frac{2f}{u^2} e^{\frac{u}{D_1}(x-l)} - \frac{2f}{uD_1} x. \end{aligned} \quad (3.183)$$

Отсюда

$$[C_1(x)]'_x = -\frac{2f}{u^2} e^{-\frac{u}{D_1} x} + \frac{2f}{u^2} e^{-\frac{u}{D_1} l} - \frac{2fx}{uD_1} e^{-\frac{u}{D_1} x}. \quad (3.184)$$

Пройнтегрируем уравнение (3.184):

$$\begin{aligned} C_1(x) = -\frac{2f}{u^2} \left(-\frac{D_1}{u}\right) e^{-\frac{u}{D_1} x} - \frac{2f}{uD_1} \int x e^{-\frac{u}{D_1} x} dx + \\ + \frac{2f}{u^2} e^{-\frac{u}{D_1} l} - x + C, \end{aligned} \quad (3.185)$$

$$\begin{aligned} \int x e^{-\frac{u}{D_1} x} dx = -\frac{D_1 x}{u} e^{-\frac{u}{D_1} x} - \int -\frac{D_1}{u} e^{-\frac{u}{D_1} x} dx = \\ = -\frac{D_1 x}{u} e^{-\frac{u}{D_1} x} + \frac{D_1}{u} \left(-\frac{D_1}{u}\right) e^{-\frac{u}{D_1} x} = \\ = -\frac{D_1 x}{u} e^{-\frac{u}{D_1} x} - \frac{D_1^2}{u^2} e^{-\frac{u}{D_1} x}, \end{aligned} \quad (3.186)$$

$$\begin{aligned} C_1(x) = \frac{2fD_1}{u^3} e^{-\frac{u}{D_1} x} - \frac{2f}{uD_1} \left(-\frac{D_1 x}{u} e^{-\frac{u}{D_1} x} - \frac{D_1^2}{u^2} e^{-\frac{u}{D_1} x}\right) + \\ + \frac{2f}{u^2} e^{-\frac{u}{D_1} l} + C = \frac{2fx}{u^2} e^{-\frac{u}{D_1} x} + \frac{2fx}{u^2} e^{-\frac{u}{D_1} l} + \\ + \frac{4fD_1}{u^3} e^{-\frac{u}{D_1} x} + C. \end{aligned} \quad (3.187)$$

Отсюда

$$z = \left(\frac{2Ix}{u^3} + \frac{2Ix}{u^2} e^{\frac{u}{D_1}(x-l)} + \frac{4ID_1}{u^3} + C e^{\frac{u}{D_1}x} \right). \quad (3.188)$$

Для искомого функции J_u получим следующее равенство:

$$J_u = \int \left[\frac{2Ix}{u^3} + \frac{2Ix}{u^2} e^{\frac{u}{D_1}(x-l)} + \frac{4ID_1}{u^3} + C e^{\frac{u}{D_1}x} \right] dx + C_1. \quad (3.189)$$

$$J_u = \frac{Ix^2}{u^3} + \frac{2I}{u^2} \left(\frac{D_1 x}{u} e^{\frac{u}{D_1}(x-l)} - \frac{D_1^2}{u^2} e^{\frac{u}{D_1}(x-l)} \right) + \\ + \frac{4ID_1}{u^3} x + C \frac{D_1}{u} e^{\frac{u}{D_1}x} + C_2. \quad (3.190)$$

Определим константы C_1 и C_2 последним уравнением. Для этого воспользуемся граничными условиями. Первое из них дает

$$J_u - \frac{D_1}{u} \frac{dJ_u}{dx} = 0 \quad \text{при } x=0, \quad (3.191)$$

т.е.

$$\frac{Ix^2}{u^3} + \frac{2ID_1 x}{u^3} e^{\frac{u}{D_1}(x-l)} - \frac{2ID_1^2}{u^4} e^{\frac{u}{D_1}(x-l)} + C \frac{D_1}{u} e^{\frac{u}{D_1}x} + \quad (3.192)$$

$$+ \frac{4ID_1 x}{u^3} + C_1 - \frac{D_1}{u} \left[\frac{2Ix}{u^3} + \frac{2Ix}{u^2} e^{\frac{u}{D_1}(x-l)} + C e^{\frac{u}{D_1}x} + \frac{4ID_1}{u^3} \right] = 0,$$

$$\frac{Ix^2}{u^3} - \frac{2ID_1^2}{u^4} e^{\frac{u}{D_1}(x-l)} + \frac{2ID_1 x}{u^3} + C_2 - \frac{4ID_1^2}{u^4} = 0. \quad (3.193)$$

Отсюда

$$C_2 = \frac{4ID_1^2}{u^4} + \frac{2ID_1^2}{u^4} e^{\frac{u}{D_1}(x-l)} - \frac{Ix^2}{u^3} - \frac{2ID_1 x}{u^3}. \quad (3.194)$$

Учитывая, что $x=0$, получаем

$$C_2 = \frac{4ID_1^2}{u^4} + \frac{2ID_1^2}{u^4} e^{-\frac{ul}{D_1}}. \quad (3.195)$$

Второе граничное условие дает

$$\frac{dJ_u}{dx} = 0 \quad \text{при } x=l, \quad (3.196)$$

$$2Ax + \frac{2Ix}{u^2} e^{\frac{u}{D_1}(x-l)} + C e^{\frac{u}{D_1}x} + \frac{4ID_1}{u^3} = 0. \quad (3.197)$$

Отсюда

$$C = -\frac{4ID_1}{u^3} e^{-\frac{u}{D_1}(x-l)} + C e^{\frac{u}{D_1}x} + \frac{4ID_1}{u^3} = 0. \quad (3.198)$$

Подставляя $x = l$ в последнее уравнение, находим

$$C = -\frac{4ID_1}{u^3} e^{-\frac{ul}{D_1}} - \frac{2Ix}{u^2} e^{-\frac{ul}{D_1}} - \frac{2Ix}{u^2} e^{-\frac{ul}{D_1}}. \quad (3.199)$$

Следовательно,

$$\begin{aligned} J_0 = & \frac{Ix^2}{u^3} + \frac{2ID_1x}{u^2} e^{\frac{u}{D_1}(x-l)} - \frac{2ID_1}{u^2} e^{\frac{u}{D_1}(x-l)} + \\ & + \frac{D_1}{u} e^{\frac{u}{D_1}x} \left[-\frac{4ID_1}{u^3} e^{-\frac{ul}{D_1}} - \frac{4Ix}{u^2} e^{-\frac{ul}{D_1}} \right] + \frac{4ID_1x}{u^3} + \\ & + \frac{4ID_1}{u^4} + \frac{2ID_1}{u^4} e^{-\frac{ul}{D_1}} = \frac{Ix^2}{u^3} + \frac{2ID_1x}{u^2} e^{\frac{u}{D_1}(x-l)} - \\ & - \frac{2ID_1}{u^4} e^{\frac{u}{D_1}(x-l)} - \frac{4ID_1}{u^4} e^{\frac{u}{D_1}(x-l)} - \frac{4ID_1}{u^3} e^{\frac{u}{D_1}(x-l)} + \\ & + \frac{4ID_1x}{u^3} + \frac{4ID_1}{u^4} + \frac{2ID_1}{u^4} e^{-\frac{ul}{D_1}} \end{aligned} \quad (3.200)$$

Окончательно получим

$$\begin{aligned} J_0 = & \frac{4ID_1}{u^4} + \frac{4ID_1x}{u^3} + \frac{Ix^2}{u^3} + \left[\frac{2ID_1x}{u^2} - \right. \\ & \left. - \frac{6ID_1}{u^4} - \frac{4ID_1}{u^3} \right] e^{\frac{u}{D_1}(x-l)} + \frac{2ID_1}{u^4} e^{-\frac{ul}{D_1}} \end{aligned} \quad (3.201)$$

Уравнение (3.201) описывает изменение экспериментальной величины J_0 в зависимости от длины аппарата. Так же как и уравнение (3.170), оно может быть использовано для определения D_1 и проверки адекватности модели.

При $x = l$ величина момента второго порядка J_0 определяется формуле

$$J'_g = \frac{2D_l}{u^3} l - \frac{2D_l^2}{u^4} + \frac{l^2}{u^2} + \frac{2D_l^2}{u^4} e^{-\frac{ul}{D_l}} \quad (3.202)$$

Величина $\frac{J'_g}{l} - (\frac{l}{u})^2 = \sigma_l^2$ является вторым центральным моментом и называется дисперсией. Тогда, разделив уравнение (3.202) на l и вычитая $(\frac{l}{u})^2$, получаем

$$\begin{aligned} \frac{J'_g}{l} - (\frac{l}{u})^2 &= \sigma_l^2 = \frac{2D_l}{u^3} - \frac{2D_l^2}{u^4} + \frac{l^2}{u^2} + \frac{2D_l^2}{u^4} e^{-\frac{ul}{D_l}} - (\frac{l}{u})^2 = \\ &= 2 \left[\frac{D_l l}{u^3} - \frac{D_l^2}{u^4} + \frac{D_l^2}{u^4} e^{-\frac{ul}{D_l}} \right]. \end{aligned} \quad (3.203)$$

Безразмерная дисперсия $\sigma_\theta^2 = \frac{\sigma_l^2}{l^2}$ определяется так:

$$\begin{aligned} \sigma_\theta^2 &= \frac{\sigma_l^2}{l^2} = 2 \left[\frac{D_l l u^2}{u^3 l^2} - \frac{D_l^2 u^2}{u^4 l^2} + \frac{D_l^2 u^2}{u^4 l^2} e^{-\frac{ul}{D_l}} \right] = \\ &= 2 \left[\frac{D_l}{ul} - (\frac{D_l}{ul})^2 + (\frac{D_l}{ul})^2 e^{-\frac{ul}{D_l}} \right] = \frac{2}{Pe^2} [Pe - 1 + e^{-Pe}]. \end{aligned} \quad (3.204)$$

При значениях числа Pe , больших, чем 10, можно принять

$$\sigma_\theta^2 \approx \frac{2}{Pe}. \quad (3.205)$$

Уравнение (3.204) является основным уравнением, используемым для расчета числа Pe по экспериментальным данным. При этом используют следующий порядок расчета. Сначала по экспериментальной кривой определяют $\int C d\tau$, $\int \tau C d\tau$, $\int \tau^2 C d\tau$, которые можно замесить соответствующими суммами $\Sigma C \Delta\tau$, $\Sigma \tau C \Delta\tau$, $\Sigma \tau^2 C \Delta\tau$. Затем с помощью уравнения (3.172) находят

$$\bar{\tau} = \frac{\Sigma \tau C}{\Sigma C}. \quad (3.206)$$

Далее определяют

$$\sigma_\tau^2 = \frac{\Sigma \tau^2 C}{\Sigma C} - \bar{\tau}^2. \quad (3.207)$$

После этого находят σ_θ^2 и, наконец, по уравнению (3.204) рассчитывают величину Pe .

Получение уравнений связи между параметрами модели и кривой распределения времени пребывания с помощью преобразования Лапласа. Преобразование Лапласа ставит в соответствие функции $C(\theta)$ действительной

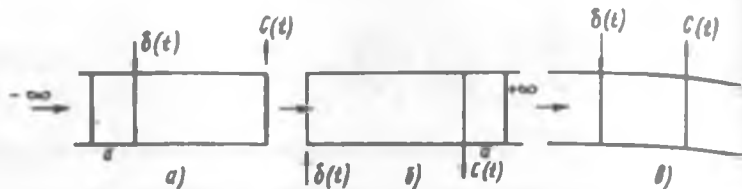


Рис. 3.18. Аппарат полубесконечной длины

переменной функцию $C(p)$ комплексной переменной p с помощью соотношения

$$\tilde{C}(p) = \int_0^{\infty} e^{-p\theta} C(\theta) d\theta. \quad (3.208)$$

Показательную функцию в подынтегральном выражении можно разложить в ряд:

$$e^{-p\theta} = 1 - p\theta + \frac{p^2\theta^2}{2!} - \frac{p^3\theta^3}{3!} + \frac{p^4\theta^4}{4!} - \dots \quad (3.209)$$

Используя это разложение, получим выражение для $\tilde{C}(p)$ в следующем виде:

$$\tilde{C}(p) = \int_0^{\infty} C(\theta) d\theta - p \int_0^{\infty} \theta C(\theta) d\theta + \frac{p^2}{2} \int_0^{\infty} \theta^2 C(\theta) d\theta - \dots \quad (3.210)$$

Отметим, что

$$\left[\frac{d\tilde{C}(p)}{dp} \right]_{p \rightarrow 0} = - \int_0^{\infty} \theta C(\theta) d\theta = -\bar{\theta} = -M_1, \quad (3.211)$$

$$\begin{aligned} \left[\frac{d^2\tilde{C}(p)}{dp^2} \right]_{p=0} &= \left[- \int_0^{\infty} \theta^2 C(\theta) d\theta \right]_{p=0} = \left[\int_0^{\infty} \theta^2 e^{-p\theta} C(\theta) d\theta \right]_{p=0} = \\ &= \int_0^{\infty} \theta^2 C(\theta) d\theta = M_2. \end{aligned} \quad (3.212)$$

Отсюда следует, что если найти функцию $\tilde{C}(p)$, т.е. решить уравнение модели в преобразованном по Лапласу виде, а затем взять соответствующую производную при $p \rightarrow 0$, то можно найти искомую связь между параметрами модели и кривой распределения времени пребывания.

Рассмотрим этот метод на примере аппарата полубесконечной длины.

Поясним смысл аппарата полубесконечной длины (рис. 3.18, а). В процессе продольного перемешивания индикатор распространяется в направлении, противоположном движению потока. Допустим, что концентрация индикатора измеряется в точках, расположенных как угодно далеко слева от места ввода индикатора. В точках, расположенных от места ввода, на расстоянии, большем, чем a , индикатор в пробах отсутствует. Таким образом, часть аппарата, находящаяся от места ввода индикатора на расстоянии, большем a , не оказывает влияния на процесс.

Следовательно, реальный аппарат, в который индикатор вводится на расстоянии не меньшем чем a , от входа потока, можно рассматривать как аппарат полубесконечной длины. Аналогичные рассуждения справедливы и для аппаратов, изображенных на рис. 3.18, б, в.

Запишем уравнение диффузионной модели в безразмерной форме (см. уравнение (3.105)):

$$\frac{\partial^2 C(\theta)}{\partial z^2} - \text{Pe} \frac{\partial C(\theta)}{\partial z} = \text{Pe} \frac{\partial C(\theta)}{\partial \theta}. \quad (3.213)$$

Граничные условия определим из уравнения материального баланса. Как и в случае аппарата конечной длины, если $z = 0$ (в точке ввода индикатора, рис. 3.18, б), то

$$uC - D_1 \frac{dC}{dx} = \frac{g}{F} \delta(t) \quad (3.214)$$

или в безразмерной форме

$$C(\theta) = \frac{1}{\text{Pe}} \frac{dC}{dz} = \delta(\theta). \quad (3.215)$$

Если же $z = \infty$, то $C(\theta)$ имеет определенное значение.

К уравнению (3.213) и граничным условиям (3.215) применим преобразование Лапласа. Имеем

$$\frac{d^2 \bar{C}}{dz^2} - \text{Pe} \frac{d\bar{C}}{dz} - \text{Pe} p \bar{C} = 0. \quad (3.216)$$

Граничное условие при $z = 0$ имеет вид

$$\bar{C} - \frac{1}{\text{Pe}} \frac{d\bar{C}}{dz} = 1 \quad (3.217)$$

и при $z = \infty$ $\bar{C}$ — определенная величина.

Общее решение уравнения (3.216), (3.217) есть

$$\bar{C} = A_1 e^{r_1 z} + A_2 e^{r_2 z}, \quad (3.218)$$

где r_1, r_2 — корни характеристического уравнения

$$r^2 - \text{Pe} r - \text{Pe} p = 0, \quad (3.219)$$

$$r_{1,2} = \frac{\text{Pe}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\text{Pe}}{2}\right)^2 + \text{Pe} p}. \quad (3.220)$$

Константы A_1 и A_2 найдем, используя граничные условия.

Если $z = \infty$, то $\bar{C}$ — конечная величина, равная

$$\bar{C} = A_1 e^{r_1 \infty} + A_2 e^{r_2 \infty}. \quad (3.221)$$

Так как $r_1 = \frac{\text{Pe}}{2} + \sqrt{\left(\frac{\text{Pe}}{2}\right)^2 + \text{Pe} p}$ — величина положительная, то $A_1 = 0$,

так как $\bar{C}$ было бы равно бесконечности.

Таким образом, решение (3.218) имеет вид

$$\bar{C} = A_2 e^{r_2 z}. \quad (3.222)$$

Отсюда

$$\frac{dC}{dr} = A_2 r_2 e^{r_2 z}.$$

При $z = 0$ имеем

$$\bar{C} = \frac{1}{Pe} \frac{d\bar{C}}{dz} + 1$$

и после подстановки в это уравнение выражения для $\frac{d\bar{C}}{dz}$ получим

$$A_2 e^{r_2 z} = \frac{1}{Pe} A_2 r_2 e^{r_2 z} + 1,$$

$$A_2 = \frac{1}{Pe} A_2 r_2 + 1,$$

$$A_2 = \frac{Pe}{Pe - r_2}.$$

Окончательно имеем

$$\bar{C} = \frac{Pe}{Pe - r_2} e^{r_2 z}.$$

При $z = 1$, т.е. в месте определения отклика, имеем

$$\bar{C} = \frac{Pe}{Pe - r_2} e^{r_2}.$$

Отметим, что $\bar{C}$ является сложной функцией от p .

Обозначим

$$x = \left(\frac{Pe}{2}\right)^2 + Pe p,$$

$$r_2 = \frac{Pe}{2} - \sqrt{x}.$$

Согласно правилу дифференцирования сложной функции получим

$$\frac{d\bar{C}}{dp} = \frac{d\bar{C}}{dr_2} \frac{dr_2}{dx} \frac{dx}{dp}.$$

$$\frac{d\bar{C}}{dr_2} = \frac{Pe e^{r_2} (Pe - r_2) + Pe e^{r_2}}{(Pe - r_2)^2}.$$

$$\frac{dx}{dp} = Pe; \quad \frac{dr_2}{dx} = -\frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{x}}.$$

Отсюда

$$\left. \frac{d\bar{C}}{dp} \right|_{p=0} = \left(1 + \frac{1}{Pe}\right) \left(-\frac{1}{Pe}\right) Pe = -1 - \frac{1}{Pe}.$$

В силу равенства (3.21.1) находим

$$\theta = 1 + \frac{1}{Pe}.$$

Раскроем физический смысл этого выражения.

(3.223) Используя определения $\theta = \frac{u}{V} t$ и $C(\theta) = \frac{C(t)}{C_0}$, получим

$$\bar{\theta} = \int_0^\infty \theta C(\theta) d\theta = \left(\frac{u}{V}\right)^2 \frac{\int_0^\infty t C(t) dt}{C_0} \quad (3.227)$$

(3.224) значение $C_0 = \frac{g}{V}$ есть

$$C_0 = \frac{u}{V} \int_0^\infty C(t) dt \quad (3.228)$$

Подставляя полученные значения в выражение (3.235), находим

$$\frac{\int_0^\infty t C(t) dt}{\int_0^\infty C(t) dt} = \frac{V}{u} + \frac{V}{u} \frac{1}{Pe} \quad (3.229)$$

(3.228) Из выражения (3.239) видно, что индикаторное среднее время пребывания (левая часть выражения) не равно действительному времени пребывания потока в экспериментальной секции V/u . Отметим, что V — объем экспериментальной секции. Это обусловлено тем, что вследствие продольного перемешивания часть индикатора распространяется вне пределов экспериментальной секции.

(3.229) Уравнение (3.239) можно использовать для определения величины Pe , если известны V и u .

Найдем уравнение связи между дисперсией σ^2 и параметрами модели.

(3.230) Для этого вычислим вторую производную функции $\bar{C}$ по p . Так как

$$\frac{d}{dp} \left(\frac{d\bar{C}}{dr} \right) = \frac{d^2 \bar{C}}{dr^2} \frac{dr}{dp} = \frac{d^2 \bar{C}}{dr^2} \frac{dr}{dx} \frac{dx}{dp} \quad (3.240)$$

$$\frac{d}{dp} \left(\frac{dr}{dx} \right) = \frac{d^2 r}{dx^2} \frac{dx}{dp} \quad (3.241)$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \bar{C}}{dp^2} &= \frac{d\bar{C}}{dr} \frac{dr}{dx} \frac{d^2 x}{dp^2} + \frac{d\bar{C}}{dr} \frac{d}{dp} \left(\frac{dr}{dx} \right) \frac{dx}{dp} + \\ &+ \frac{d}{dp} \left(\frac{d\bar{C}}{dr} \right) \frac{dr}{dx} \frac{dx}{dp} = \frac{d\bar{C}}{dr} \frac{dr}{dx} \frac{d^2 x}{dp^2} + \\ &+ \frac{d\bar{C}}{dr} \frac{d^2 r}{dx^2} \left(\frac{dx}{dp} \right)^2 + \frac{d^2 \bar{C}}{dr^2} \left(\frac{dr}{dx} \right)^2 \left(\frac{dx}{dp} \right)^2 \end{aligned} \quad (3.242)$$

Найдем выражения для всех производных, входящих в уравнение.

(3.236) Производные $\frac{d\bar{C}}{dr}$, $\frac{dr}{dx}$ и $\frac{dx}{dp}$ уже были получены ранее, а производная $\frac{d^2 \bar{C}}{dr^2} = 0$.

Так как $\frac{dx}{dp} = Pe$ — постоянная величина, то

$$\left(\frac{dx}{dp}\right)^2 = Pe^2; \quad \frac{d^2 r}{dx^2} = \frac{1}{4x\sqrt{x}}; \quad (3.243)$$

$$\frac{dr}{dx} = \frac{1}{2\sqrt{x}}; \quad \left(\frac{dr}{dx}\right)^2 = \frac{1}{4x}.$$

При $p \rightarrow 0$ имеем $x = \left(\frac{Pe}{2}\right)^2$ и, следовательно,

$$\frac{d^2 r}{dx^2} = \frac{1}{4 \frac{Pe^2}{4} \frac{Pe}{2}} = \frac{2}{Pe^3} \quad (3.244)$$

и

$$\left(\frac{dr}{dx}\right)^2 = \frac{1}{4 \left(\frac{Pe}{2}\right)^2} = \frac{1}{Pe^2}, \quad (3.245)$$

$$\frac{d^2 \bar{C}}{dr^2} = \frac{[Pe^2 e'^2 - Pe r_2 e'^2 - Pe e'^2 + Pe e'^2](Pe - r_2)^2}{(Pe - e'^2)^4} - \frac{[-2Pe + 2r_2][Pe^2 e'^2 - Pe r_2 e'^2 + Pe e'^2]}{(Pe - e'^2)^4} \quad (3.246)$$

При $p \rightarrow 0$ имеем $r_2 = 0$ и, значит,

$$\frac{d^2 \bar{C}}{dr^2} = \frac{Pe^2 Pe^2 + 2Pe Pe^2 + 2Pe Pe}{Pe^4} = \frac{Pe^4 + 2Pe^3 + 2Pe^2}{Pe^4} \quad (3.247)$$

Окончательно получим

$$\frac{d^2 \bar{C}}{dp^2} \Big|_{p \rightarrow 0} = \left(1 + \frac{1}{Pe}\right) \frac{2}{Pe^3} Pe^2 + \frac{Pe^4 + 2Pe^3 + 2Pe^2}{Pe^4} - \frac{1}{Pe^2} Pe^2 = \frac{4}{Pe^2} + \frac{4}{Pe} + 1, \quad (3.248)$$

$$\frac{d^2 \bar{C}}{dp^2} \Big|_{p \rightarrow 0} \int_0^1 \theta^2 C(\theta) d\theta; \quad \sigma_\theta^2 = \int_0^1 \theta^2 C(\theta) d\theta - \theta^2, \quad (3.249)$$

$$\sigma_\theta^2 = \frac{4}{Pe^2} + \frac{4}{Pe} + 1 - \frac{1}{Pe^2} - \frac{2}{Pe} - 1 = \frac{3}{Pe^2} + \frac{2}{Pe} = \frac{1}{Pe^2} (3 + 2Pe). \quad (3.250)$$

Выражение (3.250) используют для расчета величины Pe по экспериментальным кривым отклика системы. При исследовании структуры потоков методом ступенчатого возмущения параметры модели рассчитывают по

тем же зависимостям — уравнениям (3.204) и (3.250). Дисперсию функции отклика на ступенчатое возмущение определяют следующим образом. Очевидно, что

$$\sigma_F^2 = \int_0^1 \theta^2 dF - \theta^2. \quad (3.251)$$

В этом выражении значение интеграла проще и точнее определять не по производной функции F , а по величине $1 - F$. Для этого преобразуем интеграл:

$$\int_0^1 \theta^2 dF = - \int_0^1 \theta^2 d(1 - F). \quad (3.252)$$

Интегрируя по частям, получаем

$$- \int_0^1 \theta^2 d(1 - F) = 2 \int_0^1 \theta (1 - F) d\theta. \quad (3.253)$$

Дисперсия функции отклика есть

$$\sigma_\theta^2 = 2 \int_0^1 \theta (1 - F) d\theta - \theta^2. \quad (3.254)$$

Оценка параметров диффузионной модели в аппаратах с переменным продольным перемешиванием. При исследовании колонных аппаратов обычно определяют усредненный коэффициент продольного перемешивания, хотя в реальных условиях он может быть различным на разных участках. Это может быть вызвано непостоянством структуры потоков по высоте аппарата и их физических свойств, местными нарушениями этой структуры. Обычная диффузионная модель в этих случаях недостаточно точно отражает физическую сущность процесса. Это особенно важно при оптимизации и проектировании тепло-, массообменных аппаратов, химических реакторов, когда необходимо выявить участки с навхущей для проведения процесса гидродинамической обстановкой. Для этого нужно определить параметры продольного перемешивания Pe на отдельных участках аппарата.

Схема модели, представляющей собой ограниченный канал (аппарат), состоящий из n зон с различной интенсивностью продольного перемешивания, показана на рис. 3.19. Будем предполагать, что импульсное возмущение вводится в первую зону.

Запишем уравнения диффузионной модели для каждой из выбранных зон:

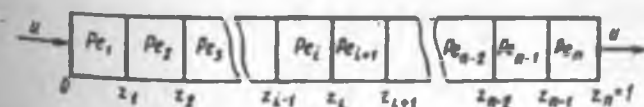


Рис. 3.19. Графическая иллюстрация диффузионной модели ограниченного канала, включающего n зон с различным продольным перемешиванием

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{Pe_1} \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - \frac{\partial C}{\partial z} + \delta(t) &= \frac{\partial C}{\partial \theta}, & 0 < z < z_1; \\
 \dots & \dots & \dots & \dots \\
 \frac{1}{Pe_k} \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - \frac{\partial C}{\partial z} &= \frac{\partial C}{\partial \theta}, & z_{k-1} < z < z_k; \\
 \dots & \dots & \dots & \dots \\
 \frac{1}{Pe_n} \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - \frac{\partial C}{\partial z} &= \frac{\partial C}{\partial \theta}, & z_{n-1} < z < z_n.
 \end{aligned}
 \tag{3.255}$$

При этом выполняются соответствующие граничные условия:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{Pe_1} \left(\frac{dC}{dz} \right)_0 - C_0 &= 0, \\
 \frac{1}{Pe_1} \left(\frac{dC}{dz} \right)_{z_1^-} - C_{z_1^-} &= \frac{1}{Pe_2} \left(\frac{dC}{dz} \right)_{z_1^+} - C_{z_1^+}, \\
 C_{z_1^-} &= C_{z_1^+}, \\
 \dots & \dots \\
 \frac{1}{Pe_k} \left(\frac{dC}{dz} \right)_{z_k^-} - C_{z_k^-} &= \frac{1}{Pe} \left(\frac{dC}{dz} \right)_{z_k^+} - C_{z_k^+}, \\
 C_{z_k^-} &= C_{z_k^+}, \\
 \dots & \dots \\
 \frac{1}{Pe_{n-1}} \left(\frac{dC}{dz} \right)_{z_{n-1}^-} - C_{z_{n-1}^-} &= \frac{1}{Pe_n} \left(\frac{dC}{dz} \right)_{z_{n-1}^+} - C_{z_{n-1}^+}, \\
 C_{z_{n-1}^-} &= C_{z_{n-1}^+}, \\
 \left(\frac{dC}{dz} \right)_{z=n} &= 0.
 \end{aligned}
 \tag{3.256}$$

При импульсном введении трасера в начальное сечение аппарата ($z=0$) уравнение для первого начального момента кривой отклика в любой k -й зоне имеет вид

$$M_1 = A_k e^{Pe_k z} + \frac{1}{Pe_k} + z, \quad z_{k-1} < z < z_k \tag{3.257}$$

если $k=1, 2, \dots, n-1$, то

$$A_k = \left(\frac{1}{Pe_{k+1}} - \frac{1}{Pe_k} + A_{k+1} e^{Pe_{k+1} z_k} \right) e^{-Pe_k z_k}; \tag{3.258}$$

если $k=n$, то

$$A_n = \frac{e^{-Pe_n}}{Pe_n}. \quad (3.259)$$

Аналогично получается уравнение для второго начального момента:

$$M_2 = \sum_1^k a_i + \frac{4z}{Pe_k} + \frac{4}{Pe_k^2} + z^2 - (2A_k z - B_k) e^{Pe_k z}, \\ z_{k-1} \leq z \leq z_k; \quad (3.260)$$

если $k = 1$, то

$$a_1 = -\frac{2A_1}{Pe_1};$$

если $k = 2, 3, \dots, n$, то

$$a_k = \frac{2z_{k-1}}{Pe_{k-1}} - \frac{2z_{k-1}}{Pe_k} + \frac{2A_{k-1}}{Pe_{k-1}} e^{Pe_{k-1} z_{k-1}} - \\ - \frac{2A_k}{Pe_k} e^{Pe_k z_{k-1}}; \quad (3.261)$$

если $k = 1, 2, \dots, n-1$, то

$$B_k = 2A_k z_k - (2A_{k+1} z_k - B_{k+1}) e^{z_k (Pe_{k+1} - Pe_k)} + \\ + (a_{k+1} - \frac{4z_k}{Pe_k} - \frac{4}{Pe_k^2} + \frac{4z_k}{Pe_{k+1}} + \frac{4}{Pe_{k+1}^2}) e^{-Pe_k z_k}; \quad (3.262)$$

если $k = n$, то

$$B_n = -(\frac{4}{Pe_n} + \frac{6}{Pe_n^2}) e^{-Pe_n}. \quad (3.263)$$

Уравнения (3.257) – (3.263) позволяют по экспериментальным кривым отклика, зафиксированным на отдельных участках аппарата, определить интенсивность продольного перемешивания. Так, например, фиксируя кривые отклика в сечениях $z_1, z_2, \dots, z_n$, можно по величине приращений дисперсии на каждом участке $\Delta\sigma^2 = \sigma_{z_k}^2 - \sigma_{z_{k-1}}^2$ последовательно, начиная с конечного участка, рассчитать все значения Pe_k . Необходимая для расчета зависимость $\Delta\sigma^2$ от параметров модели вытекает из уравнений (3.257) – (3.263). Общее выражение $\Delta\sigma^2$ для любого k -го участка аппарата имеет вид

$$\Delta\sigma^2 = \sigma_{z_k}^2 - \sigma_{z_{k-1}}^2 = \frac{2(z_k - z_{k-1})}{Pe_k} + (4A_k z_{k-1} + \\ + \frac{2A_k}{Pe_k} - B_k) e^{Pe_k z_{k-1}} - (4A_k z_k + \frac{2A_k}{Pe_k} - B_k) e^{Pe_k z_k} +$$

$$+ A_k^2 (e^{2Pe_k x_{k-1}} - e^{2Pe_k x_k}). \quad (3.264)$$

В уравнение (3.264) кроме значения Pe для исследуемого участка входят значения Pe для последующих участков, поэтому последовательным расчетом можно найти все значения Pe_k . В результате решения уравнения (3.264) находят средние значения Pe для отдельных участков аппарата. Для последнего участка (по ходу потока) уравнение (3.264) приводится к виду

$$\Delta\sigma^2 = \sigma_{s=1}^2 - \sigma_{n-1}^2 = \frac{2(1-x_{n-1})}{Pe_n} - \frac{5}{Pe_n^2} + \left[\frac{4(1-x_{n-1})}{Pe_n} + \frac{4}{Pe_n^2} \right] e^{-Pe_n(1-x_{n-1})} + \frac{e^{-Pe_n(1-x_{n-1})}}{Pe_n^2}. \quad (3.265)$$

Последние два члена уравнения (3.265) часто оказываются весьма малыми. Тогда полагают

$$Pe_n = \frac{1-x_{n-1}}{\Delta\sigma^2} + \sqrt{\left(\frac{1-x_{n-1}}{\Delta\sigma^2}\right)^2 - \frac{5}{\Delta\sigma^2}}. \quad (3.266)$$

Для аппаратов, состоящих из двух участков с разной интенсивностью продольного перемешивания, на основании уравнений (3.257) – (3.263) получаем

$$\sigma_1^2 = \frac{2(1-x_1)}{Pe_2} - \frac{2}{Pe_2^2} + \frac{2}{Pe_1} \left(x_1 + \frac{1}{Pe_2} \right) - \frac{2}{Pe_1^2} + \left(\frac{1}{Pe_1} - \frac{1}{Pe_2} \right) \frac{2e^{-Pe_1 x_1}}{Pe_1} + \left(\frac{1}{Pe_2} - \frac{1}{Pe_1} + \frac{e^{-Pe_1 x_1}}{Pe_1} \right) \times \frac{2e^{-Pe_2(1-x_1)}}{Pe_2}. \quad (3.267)$$

При больших значениях Pe последние два члена уравнения (3.267) пренебрежимо малы. Тогда можно считать, что

$$Pe_1 = \frac{x_1 + \frac{1}{Pe_2}}{C_1} + \sqrt{\left(\frac{x_1 + \frac{1}{Pe_2}}{C_1}\right)^2 - \frac{2}{C_1}}, \quad (3.268)$$

где

$$C_1 = \sigma_1^2 + \frac{2}{Pe_2^2} - \frac{2(1-x_1)}{Pe_2}. \quad (3.269)$$

Зная Pe_2 , можно по дисперсии функции отклика, зафиксированной на выходе из первой зоны, с помощью уравнения (3.268) найти Pe_1 .

Пример. В результате исследования продольного перемешивания сплошной фазы в вибрационном экстракторе (диаметр 300 мм, высота 6 м, амплитуда вибраций 4,5 мм, частота 61 мин⁻¹) были получены следующие

ные значения дисперсий С-кривых в сечении $z_1 = 0,224$ и в сечении на выходе $z_2 = 1$ (табл. 3.4).

Таблица 3.4

Значения дисперсий С-кривых

Номер опыта	$u, \text{м}^3/\text{ч}$	$\sigma_{z_1}^2$	$\sigma_{z_2}^2$	Pe_1	Pe_2
1	3	0,0083	0,0191	52	141
2	4	0,0135	0,0201	63	134
3	5	0,0109	0,0187	38	194

Искомые величины были рассчитаны по уравнениям (3.267), (3.268). Как видно, интенсивность продольного перемешивания на небольшом начальном участке колонны в 2–5 раз выше, чем в остальной части, что вызвано влиянием условий входа потока в аппарат.

§ 3.5. Ячеечная модель

Вывод основных уравнений модели. Рассматриваемая модель, впервые предложенная для каскада реакторов с мешалками, является одной из наиболее простых. В этом случае аппарат состоит из ряда последовательно соединенных ячеек, через которые проходит поток вещества (рис. 3.20).

Сделаем следующие допущения: 1) в каждой ячейке осуществляется идеальное перемешивание; 2) между ячейками отсутствует обратное перемешивание. Параметром ячейечной модели, количественно характеризующим продольное перемешивание, служит число ячеек полного перемешивания N . С увеличением N структура потока приближается к модели полного вытеснения, а с уменьшением N — к модели идеального смешения.

Запишем уравнения сохранения массы для каждой из ячеек (для простоты предположим, что ячейки имеют одинаковый объем $V_{\text{я}}$):

$$\begin{aligned} uC_{\text{вх}} - uC_1 &= V_{\text{я}} \frac{dC_1}{dt}, \\ uC_1 - uC_2 &= V_{\text{я}} \frac{dC_2}{dt}, \\ &\dots \dots \dots \\ uC_{j-1} - uC_j &= V_{\text{я}} \frac{dC_j}{dt}, \\ &\dots \dots \dots \\ uC_{N-1} - uC_N &= V_{\text{я}} \frac{dC_N}{dt}. \end{aligned} \quad (3.270)$$



Рис. 3.20. Схема ячейечной модели: u — расход вещества через аппарат; $C_{\text{вх}}$ — концентрация на входе

Разделив левую и правую части уравнений (3.270) на расход u , получаем:

$$\begin{aligned} C_{вх} - C_1 &= \bar{r} \frac{dC_1}{dt}, \\ C_1 - C_2 &= \bar{r} \frac{dC_2}{dt}, \\ &\dots\dots\dots \\ C_{j-1} - C_j &= \bar{r} \frac{dC_j}{dt}, \\ &\dots\dots\dots \\ C_{N-1} - C_N &= \bar{r} \frac{dC_N}{dt}. \end{aligned} \quad (3.271)$$

Соответствующие начальные условия для системы уравнений (3.271) имеют вид

$$C_1 = C_{1н}, \quad C_2 = C_{2н}, \quad \dots, \quad C_N = C_{Nн} \quad \text{при } t=0. \quad (3.272)$$

Система уравнений (3.271) вместе с начальными условиями (3.272) образуют ячеистую модель структуры потоков. Для того чтобы проанализировать свойства модели, рассмотрим отклик ячеистой модели на стандартные возмущения.

Отклик модели на ступенчатое возмущение со скачкообразным уменьшением концентрации до нуля (метод вымывания). Будем искать отклик модели, последовательно решая уравнения системы (3.271), начиная с первой ячейки.

Первая ячейка.

В методе вымывания концентрация индикатора на входе равна нулю. Следовательно, $C_{вх} = 0$ и исходное уравнение сводится к следующему:

$$-C_1 = \bar{r} \frac{dC_1}{dt}, \quad (3.273)$$

откуда, разделяя переменные, имеем

$$\frac{dC_1}{C_1} = - \frac{dr}{\bar{r}}. \quad (3.274)$$

Интегрирование уравнения (3.274) даст

$$C_1 = K e^{-t/\bar{r}}. \quad (3.275)$$

Неизвестную константу K найдем из начального условия

$$C_1 = C_{1н} = C_{н} \quad \text{при } t=0. \quad (3.276)$$

Отсюда

$$K = C_{н}. \quad (3.277)$$

Подставляя (3.275) в (3.277), получаем вид отклика на выходе из первой ячейки:

$$C_1 = C_n e^{-t/\bar{t}}. \quad (3.278)$$

Вторая ячейка.

Выходом для второй ячейки является выход первой. Тогда уравнение сохранения вещества принимает вид

$$C_1 - C_2 = \bar{t} \frac{dC_2}{dt} \quad (3.279)$$

или

$$C_n e^{-t/\bar{t}} - C_2 = \bar{t} \frac{dC_2}{dt}, \quad (3.280)$$

уравнение (3.280) — неоднородное дифференциальное уравнение первого порядка. Будем решать его методом неопределенных множителей. Соответствующее однородное уравнение имеет вид

$$\bar{t} \frac{dC_2}{dt} + C_2 = 0. \quad (3.281)$$

Его решение есть

$$C_2 = A(t) e^{-t/\bar{t}}, \quad (3.282)$$

где $A(t)$ — неопределенный множитель.

Подставим решение однородного уравнения (3.282) в (3.280):

$$\frac{dC_2}{dt} = A'_t e^{-t/\bar{t}} + A \left(-\frac{1}{\bar{t}}\right) e^{-t/\bar{t}}, \quad (3.283)$$

$$\bar{t} \left[A'_t e^{-t/\bar{t}} - \frac{A(t)}{\bar{t}} e^{-t/\bar{t}} \right] + A(t) e^{-t/\bar{t}} = C_n e^{-t/\bar{t}}. \quad (3.284)$$

Приводя подобные члены, имеем

$$\frac{dA}{dt} = \frac{C_n}{\bar{t}}. \quad (3.285)$$

Решим дифференциальное уравнение (3.285) относительно искомого коэффициента:

$$A(t) = \frac{C_n}{\bar{t}} t + K. \quad (3.286)$$

Теперь, подставляя найденное выражение $A(t)$ в (3.282), получаем

$$C_2 = \left[\frac{C_n}{\bar{t}} t + K \right] e^{-t/\bar{t}}. \quad (3.287)$$

Неизвестную константу K можно найти из начального условия

$$C_2 = C_{2n} = C_n \text{ при } t = 0. \quad (3.288)$$

Откуда

$$K = C_n. \quad (3.289)$$

Таким образом, отклик на выходе второй ячейки имеет вид

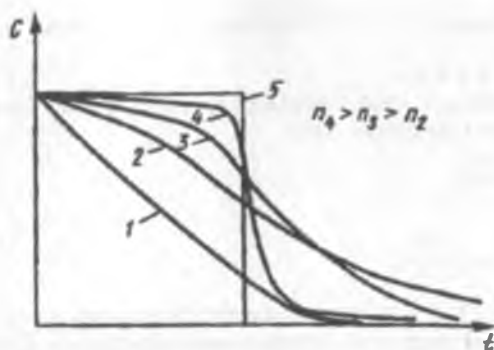


Рис. 3.21. Отклик ячеечной модели на скачкообразное уменьшение концентрации для различного числа ячеек: 1 — при идеальном смешении; 2, 3, 4 — при числе ячеек n_2 , n_3 и n_4 соответственно; 5 — при идеальном вытеснении

$$C_2 = C_n \left[1 + \left(\frac{t}{\tau} \right) \right] e^{-t/\tau}. \quad (3.290)$$

Продолжая аналогичные рассуждения для третьей, ..., четвертой, ..., N -й ячейки, получаем следующее выражение для отклика ячеечной модели на скачкообразное уменьшение концентрации до нуля:

$$\frac{C_N}{C_n} = \left[1 + \left(\frac{t}{\tau} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{t}{\tau} \right)^2 + \dots + \frac{1}{(N-1)!} \left(\frac{t}{\tau} \right)^{N-1} \right] e^{-t/\tau}. \quad (3.291)$$

На рис. 3.21 изображена зависимость выходной концентрации по методу вымывания для различного числа ячеек.

Уравнение (3.291) удобно записать в безразмерном виде:

$$C(\theta) = \left[1 + N\theta + \frac{1}{2} N^2 \theta^2 + \dots + \frac{N^{N-1}}{(N-1)!} \theta^{N-1} \right] e^{-N\theta}. \quad (3.292)$$

Отклик модели на импульсное возмущение. Для получения функции отклика ячеечной модели будем аналогично предыдущему случаю находить отклики на выходе первой, второй и т.д. ячеек.

Первая ячейка.

Так как концентрация на входе $C_{вх}$ в первую ячейку для импульсного возмущения равна нулю, то уравнение сохранения вещества примет вид

$$-C_1 = \tau \frac{dC_1}{dt}. \quad (3.293)$$

Его решение есть

$$C_1 = K e^{-t/\tau}. \quad (3.294)$$

Неизвестную константу K находим из начального условия

$$C_1 = C_n \quad \text{при } t = 0. \quad (3.295)$$

Отсюда

$$K = C_n \quad (3.296)$$

и

$$C_1 = C_n e^{-t/\bar{t}}. \quad (3.297)$$

Вторая ячейка.

Входом во вторую ячейку является выход из первой. Тогда для второй ячейки имеем

$$C_n e^{-t/\bar{t}} - C_2 = \bar{t} \frac{dC_2}{dt}. \quad (3.298)$$

Решаем сначала соответствующее однородное уравнение

$$\bar{t} \frac{dC_2}{dt} + C_2 = 0, \quad (3.299)$$

которое после разделения переменных примет вид

$$C_2 = A(t) e^{-t/\bar{t}}. \quad (3.300)$$

Для нахождения неизвестного множителя $A(t)$ подставим решение (3.300) в исходное уравнение (3.298):

$$t [A(t) e^{-t/\bar{t}} - \frac{A(t)}{\bar{t}} e^{-t/\bar{t}}] + A e^{-t/\bar{t}} = C_n e^{-t/\bar{t}}. \quad (3.301)$$

После приведения подобных членов в уравнении (3.301) приходим к дифференциальному уравнению первого порядка относительно $A(t)$:

$$\bar{t} \frac{dA(t)}{dt} = C_n. \quad (3.302)$$

Его решение есть

$$A(t) = \frac{C_n}{\bar{t}} t + K. \quad (3.303)$$

Подставляя (3.303) в уравнение (3.300) и учитывая начальное условие $C_2 = 0$ при $t = 0$, получаем функцию отклика на выходе второй ячейки:

$$C_2 = C_n \frac{t}{\bar{t}} e^{-t/\bar{t}}. \quad (3.304)$$

Аналогичные решения для третьей, четвертой, ..., N -й ячейки дают следующую общую функцию отклика ячеечной модели, включающей N ячеек:

$$C_N = C_n \left(\frac{t}{\bar{t}}\right)^{N-1} \frac{1}{(N-1)!} e^{-t/\bar{t}}. \quad (3.305)$$

Введя безразмерную концентрацию $C(\theta) = C_N/C_n$ и время $\theta = t/\bar{t}$, функцию отклика (3.305) можно представить в безразмерном виде:

$$C(\theta) = \frac{N^N \theta^{N-1}}{(N-1)!} e^{-N\theta}. \quad (3.306)$$

Отклик модели на ступенчатое возмущение со скачкообразным воз-

растанием концентрации. Определим концентрацию на выходе каждой из ячеек.

Первая ячейка.

Так как для данного вида возмущения концентрация на входе $C_{вх}$ отлична от нуля, то уравнение сохранения вещества для первой ячейки запишется следующим образом:

$$C_{вх} - C_1 = \bar{t} \frac{dC_1}{dt}, \quad (3.307)$$

а начальное условие имеет вид

$$C_1 = 0 \quad \text{при} \quad t = 0. \quad (3.308)$$

Уравнение (3.307) можно представить в виде

$$\frac{d(C_{вх} - C_1)}{C_{вх} - C_1} = - \frac{dt}{\bar{t}}. \quad (3.309)$$

Интегрирование последнего уравнения дает

$$(C_{вх} - C_1) = K e^{-t/\bar{t}}. \quad (3.310)$$

Константу интегрирования K найдем из начального условия

$$K = C_{вх} \quad \text{при} \quad t = 0. \quad (3.311)$$

Тогда на выходе первой ячейки получим следующую функцию отклика:

$$C_1 = C_{вх} (1 - e^{-t/\bar{t}}). \quad (3.312)$$

Вторая ячейка.

Входом для второй ячейки является отклик первой ячейки (3.312). В этом случае уравнение сохранения вещества для второй ячейки запишется так:

$$C_{вх} (1 - e^{-t/\bar{t}}) - C_2 = \bar{t} \frac{dC_2}{dt}. \quad (3.313)$$

Решение соответствующего однородного уравнения есть

$$C_2 = A(t) e^{-t/\bar{t}}. \quad (3.314)$$

Для отыскания неопределенного множителя $A(t)$ подставим решение (3.314) в исходное неоднородное уравнение (3.313):

$$C_{вх} (1 - e^{-t/\bar{t}}) - A(t) e^{-t/\bar{t}} = \bar{t} [A'(t) e^{-t/\bar{t}} - \frac{A(t)}{\bar{t}} e^{-t/\bar{t}}]. \quad (3.315)$$

Приводя подобные члены, получаем следующее уравнение относительно искомого множителя $A(t)$:

$$\frac{dA(t)}{dt} = \frac{C_{вх}}{\bar{t}} (e^{t/\bar{t}} - 1). \quad (3.316)$$

Его решение есть

$$A(t) = \frac{C_{\text{вх}}}{\bar{t}} (\bar{t} e^{t/\bar{t}} - t) + K. \quad (3.317)$$

Подставляя теперь выражение (3.317) в (3.314), получаем решение неоднородного дифференциального уравнения (3.313):

$$C_2 = \left[-\frac{C_{\text{вх}}}{\bar{t}} (\bar{t} e^{t/\bar{t}} - t) + K \right] e^{-t/\bar{t}}. \quad (3.318)$$

Константу K найдем из начального условия

$$C_2 = 0, K = -C_{\text{вх}} \text{ при } t = 0. \quad (3.319)$$

Подстановка (3.319) в уравнение (3.318) дает отклик на выходе второй ячейки:

$$C_2 = C_{\text{вх}} \left[1 - \left(1 + \left(\frac{t}{\bar{t}} \right) \right) e^{-t/\bar{t}} \right]. \quad (3.320)$$

Продолжая аналогичные рассуждения для третьей, четвертой, ..., N -й ячейки, получаем следующую функцию отклика на выходе из последней N -й ячейки:

$$\begin{aligned} \frac{C_N}{C_{\text{вх}}} &= 1 - \left[1 + \left(\frac{t}{\bar{t}} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{t}{\bar{t}} \right)^2 + \frac{1}{3!} \left(\frac{t}{\bar{t}} \right)^3 + \dots \right. \\ &\quad \left. \dots + \frac{1}{(N-1)!} \left(\frac{t}{\bar{t}} \right)^{N-1} \right] e^{-t/\bar{t}}. \end{aligned} \quad (3.321)$$

Введя безразмерную концентрацию $F(\theta) = C_N/C_{\text{вх}}$ и время $\theta = t/\bar{t}$, находим

$$F(\theta) = 1 - \left[1 + N\theta + \frac{N^2 \theta^2}{2} + \frac{N^3 \theta^3}{3!} + \dots + \frac{N^{N-1} \theta^{N-1}}{(N-1)!} \right] e^{-N\theta}. \quad (3.322)$$

На рис. 3.22 изображена зависимость выходной концентрации при ступенчатом возмущении для различного числа ячеек.

Как уже отмечалось, функция отклика $F(\theta)$ называется F -кривой и характеризует распределение элементов потока по времени пребывания. Сравнивая полученную функцию отклика (3.322) с откликом ячеечной мо-

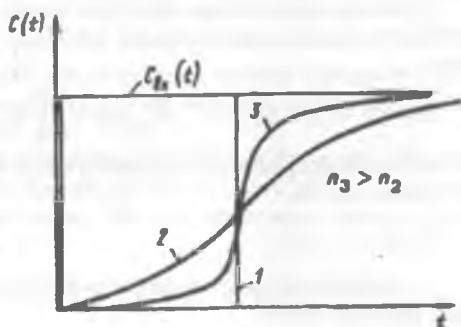


Рис. 3.22. Отклик ячеечной модели на ступенчатое возмущение: 1 — при малом числе ячеек; 2, 3 — при числе ячеек n_2 и n_3 соответственно

дели (3.292) в методе вымывания, получаем соотношение связи между ними

$$F(\theta) = 1 - I(\theta), \quad (3.323)$$

где $I(\theta)$ – безразмерный отклик модели в методе вымывания, равный

$$I(\theta) = \left[1 + N\theta + \frac{1}{2}N^2\theta^2 + \dots + \frac{N^{N-1}\theta^{N-1}}{(N-1)!} \right] e^{-N\theta}. \quad (3.324)$$

Передаточная функция объектов, описываемых ячеечной моделью. Согласно определению передаточная функция объекта $W(p)$ имеет вид

$$W(p) = \frac{\tilde{C}_{вых}}{\tilde{C}_{вх}} = \frac{\tilde{C}_N}{\tilde{C}_{вх}}. \quad (3.325)$$

Умножим и разделим правую часть равенства (3.325) на $\tilde{C}_{N-1}$.

$$W(p) = \frac{\tilde{C}_{N-1}}{\tilde{C}_{вх}} \frac{\tilde{C}_N}{\tilde{C}_{N-1}}. \quad (3.326)$$

Второй сомножитель в правой части уравнения (3.326) представляет собой передаточную функцию N -й ячейки, т.е. $W_N(p)$. Тогда последнее уравнение можно переписать в виде

$$W(p) = \frac{\tilde{C}_{N-1}}{\tilde{C}_{вх}} W_N(p). \quad (3.327)$$

Аналогично, умножив и разделив правую часть равенства (3.327) на $\tilde{C}_{N-2}$, получим

$$W(p) = \frac{\tilde{C}_{N-2}}{\tilde{C}_{вх}} \frac{\tilde{C}_{N-1}}{\tilde{C}_{N-2}} W_N(p). \quad (3.328)$$

Второй сомножитель в правой части уравнения (3.328) является передаточной функцией $(N-1)$ -й ячейки. Тогда уравнение (3.328) можно записать в виде

$$W(p) = \frac{\tilde{C}_{N-2}}{\tilde{C}_{вх}} W_{N-1}(p) W_N(p). \quad (3.329)$$

Проводя аналогичные преобразования, приходим к следующему выражению для передаточной функции объекта, описываемого ячеечной моделью:

$$W(p) = W_1(p) W_2(p) \dots W_N(p) = \prod_{i=1}^N W_i(p). \quad (3.330)$$

Так как в ячеечной модели каждая ячейка представляется моделью идеального смещения, то

$$W_i(p) = \frac{1}{1 + \bar{t}p}, \quad (3.331)$$

где $\bar{t}$ – среднее время пребывания в ячейке (предполагается, что ячейки имеют равный объем).

С учетом выражения (3.331) получаем окончательное выражение для передаточной функции ячеечной модели:

$$W(p) = \frac{1}{(1 + \bar{t}_c p)^N}. \quad (3.332)$$

Рассмотрим теперь следующие предельные случаи.

1. Число ячеек N в ячеечной модели равно 1. В этом случае передаточная функция имеет вид

$$W(p) = \frac{1}{1 + \bar{t}_c p}. \quad (3.333)$$

Выражение (3.333) соответствует передаточной функции модели идеального смещения и ячеечная модель соответственно переходит в модель идеального смещения.

2. Число ячеек N в ячеечной модели стремится к бесконечности. В этом случае имеем

$$W(p) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{(1 + \bar{t}_c p)^N}. \quad (3.334)$$

Пусть $x = \frac{1}{\bar{t}_c p}$ и $\bar{t}_c$ — среднее время пребывания в объекте, описываемом ячеечной моделью. Тогда

$$N = \bar{t}_c p x. \quad (3.335)$$

Подставляя (3.335) в уравнение (3.334), имеем

$$W(p) = \lim_{x \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{(1 + \frac{1}{x})^{\bar{t}_c p x}} \right] = \left(1 + \frac{1}{x}\right)^{-x \bar{t}_c p} \quad (3.336)$$

или

$$W(p) = \lim_{x \rightarrow \infty} \left[\left(1 + \frac{1}{x}\right)^x \right]^{-\bar{t}_c p}. \quad (3.337)$$

Учитывая, что

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{1}{x}\right)^x = e, \quad (3.338)$$

получаем следующее выражение для передаточной функции:

$$W(p) = e^{-\bar{t}_c p}. \quad (3.339)$$

Передаточная функция (3.339) соответствует модели идеального вытеснения. Следовательно, в случае, когда $N \rightarrow \infty$, ячеечная модель переходит в модель идеального вытеснения.

Оценка параметра N ячеечной модели. Для оценки параметра N ячеечной модели определим начальный момент второго порядка M_2' для функции отклика на импульсное возмущение, воспользовавшись передаточной функцией этой модели. Имеем

$$M_2' = W''(p=0) = N(N+1)(1 + \bar{t}_c p)^{-N-2} \bar{t}_c^2 \big|_{p=0} = N(N+1) \bar{t}_c^2 =$$

$$= N^2 \bar{t}^2 + M^2 = \bar{t}_c^2 \left(1 + \frac{1}{N}\right). \quad (3.340)$$

Соответственно центральный размерный момент второго порядка μ_2^t определяется выражением

$$\mu_2^t = M_2^t - \bar{t}_c^2 = \frac{\bar{t}_c^2}{N}. \quad (3.341)$$

Разделив выражение (3.341) на квадрат среднего времени пребывания в системе $\bar{t}_c^2$, получаем уравнение связи параметра ячеечной модели N с безразмерной дисперсией σ_θ^2 функции отклика ячеечной модели на импульсное возмущение:

$$N = \frac{1}{\sigma_\theta^2}. \quad (3.342)$$

Выражение (3.342) — основное для оценки параметра ячеечной модели N по экспериментальным кривым отклика на импульсное возмущение.

Сравнивая выражения (3.342) и (3.204), получаем следующее уравнение связи между параметрами диффузионной и ячеечной моделей:

$$\frac{1}{N} = \frac{2}{Pe^2} (Pe - 1 + e^{-Pe}). \quad (3.343)$$

При $Pe > 10$ последнее соотношение можно упростить. В этом случае уравнение связи принимает вид

$$N \approx \frac{Pe}{2}. \quad (3.344)$$

Пример.

Структура потока жидкости в насадочной колонне исследовалась импульсным методом. Было предложено описывать структуру потока ячеечной моделью. Требуется оценить параметр ячеечной модели и установить целесообразность применения этой модели.

Решение. Результаты обработки экспериментальной S -кривой ($C_s = C_s(t)$), снятой на выходе потока жидкости из насадочной колонны, приведены в табл. 3.5.

Таблица 3.5

Исходные данные и результаты обработки S -кривой при исследовании структуры потока жидкости в насадочной колонне

t, c	0	40	80	120	160	200	240
$C_s(t), \text{г/л}$	0	0,30	0,50	0,35	0,20	0,10	0
$C(t), c^{-1}$	0	0,3/58	0,5/58	0,35/58	0,2/58	0,1/58	0
θ	0	0,4	0,8	1,2	1,6	2,0	2,4
$C_H(\theta) = \bar{t}C(t)$	0	0,52	0,86	0,60	0,34	0,17	0
$C_H(\theta)$ при $N = 5$	0	0,55	0,98	0,73	0,40	0,20	0

$N = 5$

Определим среднее время пребывания индикатора в потоке $\bar{t}$:

$$\bar{t} = \frac{\int_0^{\infty} t C_2(t) dt}{\int_0^{\infty} C_2(t) dt} \approx \frac{\sum_{i=1}^7 t_i C_i}{\sum_{i=1}^7 C_i} \approx 100. \quad (3.345)$$

Перейдем далее к нормированной С-кривой $Q(t)$ (см. табл. 3.5):

$$C(t) = \frac{C_2(t)}{\int_0^{\infty} C_2(t) dt} \approx \frac{C_2(t)}{\sum_{i=1}^7 C_i \Delta t} \approx \frac{C_{i2}}{58} \cdot e^{-t}. \quad (3.346)$$

Найдем начальный размерный момент второго порядка M_2^t :

$$M_2^t = \int_0^{\infty} t^2 C(t) dt \approx \sum_{i=1}^7 t_i^2 C_i \Delta t \approx 12\,200, e^2. \quad (3.347)$$

Следовательно, безразмерная дисперсия С-кривой σ_0^2 есть

$$\sigma_0^2 = \frac{M_2^t}{\bar{t}^2} - 1 = 1,22 - 1 = 0,22. \quad (3.348)$$

Используя уравнение связи безразмерной дисперсии σ_0^2 с числом ячеек N , получаем

$$N = \frac{1}{\sigma_0^2} = \frac{1}{0,22} = 5. \quad (3.349)$$

Значения безразмерной С-кривой по ячеечной модели $C_T(\theta)$ при найденном числе ячеек определим из выражения для функции отклика ячеечной модели на импульсное возмущение (см. табл. 3.5):

$$C_T(\theta) = \frac{N^N \theta^{N-1} e^{-N\theta}}{(N-1)!} = \frac{3125 \theta^4 e^{-5\theta}}{4 \cdot 3 \cdot 2}. \quad (3.350)$$

По имеющимся экспериментальным данным дисперсию воспроизводимости оценить невозможно. Поэтому с помощью критерия Фишера оценим целесообразность использования ячеечной модели, сравнив дисперсию относительно среднего S_{cp}^2 с дисперсией адекватности $S_{ад}^2$.

Среднее значение безразмерной кривой отклика $\bar{C}(\theta)$ составляет

$$\bar{C}(\theta) = \frac{0,52 + 0,86 + 0,60 + 0,34 + 0,17}{7} = 0,35. \quad (3.351)$$

Найдем дисперсию относительно среднего:

$$S_{cp}^2 = \frac{\sum (C_{i2}(\theta) - \bar{C}(\theta))^2}{f_{cp}} = \frac{0,17^2 + 0,51^2 + 0,15^2 + 0,01^2 + 0,18^2 + 0,55^2 + 0,35^2}{7 - 1} = 0,1048. \quad (3.352)$$

Найдем дисперсию адекватности:

$$S_{ад}^2 = \frac{\sum_{i=1}^7 (C_{iэ} - C_{iт})^2}{f_{ад}} = \frac{0^2 + 0.03^2 + 0.12^2 + 0.13^2 + 0.06^2 + 0.03^2 + 0^2}{7-1} = 0,00612. \quad (3.353)$$

Составим F -отношение:

$$F = \frac{S_{ср}^2}{S_{ад}^2} = \frac{0,1048}{0,00612} = 17,124. \quad (3.354)$$

Соответствующее табличное значение критерия Фишера для чисел степеней свободы $f_{ср} = 6$ и $f_{ад} = 6$ и уровня значимости $\alpha = 1\%$ есть

$$F_{\alpha=0,01}^{табл}(6,6) = 8,47. \quad (3.355)$$

Отсюда $F > F_{\alpha=0,01}^{табл}(6,6)$ и дисперсия относительно среднего значимо отличается от дисперсии адекватности. Следовательно, использовать ячеечную модель целесообразно.

§ 3.6. Ячеечная модель с обратными потоками (рециркуляционная)

Вывод основных уравнений модели. Ячеечная модель не всегда обеспечивает адекватное воспроизведение структуры потоков в реальном аппарате (как, например, при описании движения потоков фаз в экстракторе). В связи с этим разработаны модификации такой модели. Одной из наиболее распространенных модификаций является ячеечная модель с обратными потоками. Согласно этой модели аппарат рассматривают как последовательность зон с сосредоточенными параметрами, причем каждая из зон эквивалентна ячейке идеального перемешивания. Далее предполагают, что между ячейками существуют обратные потоки. На рис. 3.23 изображена схема потоков по ячеечной модели с обратными потоками.

Запишем уравнения сохранения вещества для каждой из ячеек с учетом обратных (рециркуляционных) потоков между ними.

Первая ячейка:

$$LC_{вх} + eC_2 - (L + e)C_1 = V_я \frac{dC_1}{dt}; \quad (3.356)$$



Рис. 3.23. Схема потоков по ячеечной модели с обратными потоками: L — поток вещества по аппарату; e — обратный поток вещества по аппарату; C_i — концентрация на выходе i -й ячейки

j-я ячейка:

$$(L + e)C_{j-1} + eC_{j+1} - (L + 2e)C_j = V_{\pi} \frac{dC_j}{dt};$$

N-я ячейка:

$$(L + e)C_{N-1} - (L + e)C_N = V_{\pi} \frac{dC_N}{dt},$$

где V_{π} — объем ячейки (предполагается, что ячейки имеют равный объем); при этом выполняются следующие начальные условия:

$$C_1 = C_{1\pi}, \dots, C_j = C_{j\pi}, \dots, C_N = C_{N\pi} \text{ при } t = 0. \quad (3.357)$$

Величина e/L называется *долей обратного потока* и обозначается как $e/L = f$.

Соответственно отношение V_{π}/L определяет среднее время пребывания потока в ячейке $\bar{\tau}$. С учетом введенных обозначений системы уравнений (3.356) и (3.357) переписутся в виде

$$\begin{aligned} C_{\text{вх}} + fC_2 - (1 + f)C_1 &= \bar{\tau} \frac{dC_1}{dt} \\ \dots \dots \dots \\ (1 + f)C_{j-1} + fC_{j+1} - (1 + 2f)C_j &= \bar{\tau} \frac{dC_j}{dt} \\ \dots \dots \dots \\ (1 + f)C_{N-1} + (1 + f)C_N &= \bar{\tau} \frac{dC_N}{dt}. \end{aligned} \quad (3.358)$$

$$C_1 = C_{1\pi}, \dots, C_j = C_{j\pi}, \dots, C_N = C_{N\pi} \text{ при } t = 0.$$

Система уравнений (3.358) представляет собой математическое описание ячейочной модели с обратными потоками. При $f \rightarrow 0$ ячейочная модель с обратными потоками переходит в ячейчную модель, а при $f, N \rightarrow \infty$ — в диффузионную модель.

Рассмотрим отклики ячейочной модели с обратными потоками на стандартные возмущения.

Отклик модели на импульсное возмущение. В этом случае безразмерная функция отклика $C(\theta)$ имеет вид

$$C(\theta) = \sum_{i=1}^N A_i \exp(K_i \theta), \quad (3.359)$$

где

$$K_i = \frac{N}{1-x} (2x^{1/2} \cos p_i - 1 - x), \quad (3.360)$$

$$A_i = -2Nx^{-N/2} \sin^2 p_i / D'(p_i), \quad (3.361)$$

причем p_i — корни уравнения

$$D(p) = x^{-1/2} \sin[(N+1)p] - 2 \sin(Np) + x^{1/2} \sin[(N-1)p], \quad (3.362)$$

число которых равно N , а значения лежат в интервале $0 < p_i < \pi$; $D'(p_i)$ —

значение производной функции (3.362) при $p = p_i$; $x = f/(1+f)$.

Отклик модели на ступенчатое возмущение. Безразмерная функция отклика $F(\theta)$ определяется как

$$F(\theta) = 1 - \sum_{i=1}^N \frac{A_i}{K_i} \exp(K_i \theta), \quad (3.363)$$

где A_i и K_i находятся из уравнений (3.360)–(3.362).

Передающая функция объектов, описываемых ячеечной моделью с обратными потоками.

Рассмотрим схему получения передаточной функции модели для случая трех ячеек и далее обобщим результат на случай N ячеек.

Пусть $N=3$. Тогда система уравнений математического описания (3.358) примет вид

$$\begin{aligned} C_{вх} + fC_2 - (1+f)C_1 &= \bar{r} \frac{dC_1}{dt}, \\ (1+f)C_1 + fC_3 - (1+2f)C_2 &= \bar{r} \frac{dC_2}{dt}, \\ (1+f)C_2 - (1-f)C_3 &= \bar{r} \frac{dC_3}{dt}. \end{aligned} \quad (3.364)$$

Запишем преобразование Лапласа системы уравнений (3.364), предполагая, что входной сигнал соответствует импульсному возмущению:

$$\begin{aligned} 1 + f\tilde{C}_2 - (1+f)\tilde{C}_1 &= \bar{r}p\tilde{C}_1, \\ (1+f)\tilde{C}_1 + f\tilde{C}_3 - (1+2f)\tilde{C}_2 &= \bar{r}p\tilde{C}_2, \\ (1+f)\tilde{C}_2 - (1-f)\tilde{C}_3 &= \bar{r}p\tilde{C}_3. \end{aligned} \quad (3.365)$$

Введя обозначения $\gamma = 1+f$ и $q = N\bar{r}p$, получаем

$$\begin{aligned} 1 + f\tilde{C}_2 - \gamma\tilde{C}_1 &= \frac{q}{3} \tilde{C}_1, \\ \gamma\tilde{C}_1 + f\tilde{C}_3 - (\gamma+f)\tilde{C}_2 &= \frac{q}{3} \tilde{C}_2, \\ \gamma\tilde{C}_2 - \gamma\tilde{C}_3 &= \frac{q}{3} \tilde{C}_3. \end{aligned} \quad (3.366)$$

Решим последнюю систему уравнений относительно искомой величины $\tilde{C}_3$. Из третьего уравнения системы (3.366) следует

$$\tilde{C}_2 = \tilde{C}_3 \frac{(\gamma + \frac{q}{3})}{\gamma}. \quad (3.367)$$

Подставив полученные выражения для $\tilde{C}_2$ во второе уравнение, имеем

$$\gamma\tilde{C}_1 + f\tilde{C}_3 - \frac{(\gamma + \frac{q}{3})(\gamma + f + \frac{q}{3})}{\gamma} \tilde{C}_3 = 0 \quad (3.368)$$

$$\tilde{C}_1 = \frac{\gamma^3 + 2\gamma \frac{q}{3} + f \frac{q}{3} + \left(\frac{q}{3}\right)^2}{\gamma^2} \tilde{C}_3. \quad (3.369)$$

Наконец, выражения для C_1 и C_3 подставляем в первое уравнение системы (3.366):

$$\left(\frac{q}{3} + \gamma\right) \frac{\left(\gamma^3 + 2\gamma \frac{q}{3} + f \frac{q}{3} + \left(\frac{q}{3}\right)^2\right)}{\gamma^2} \tilde{C}_3 - \frac{f\left(\gamma + \frac{q}{3}\right)}{\gamma} \tilde{C}_3 = 1. \quad (3.370)$$

Отсюда находим выражение для $\tilde{C}_3$, определяющее передаточную функцию ячеечной модели с обратными потоками $W(q)$ при $N=3$:

$$\begin{aligned} \tilde{C}_3 = W(q) &= \frac{1}{\frac{(\gamma + \frac{q}{3})}{\gamma} \frac{\gamma^3 + 2\gamma \frac{q}{3} + f \frac{q}{3} + \left(\frac{q}{3}\right)^2}{\gamma} - \gamma f} = \\ &= \frac{1}{\frac{1}{27\gamma^2} q^3 + \frac{3\gamma + f}{9\gamma^2} q^2 + q + 1}. \end{aligned} \quad (3.371)$$

Аналогично, в случае N ячеек получаем следующее выражение для передаточной функции:

$$W(q) = \frac{1}{\frac{1}{\gamma^{N-1}} \sum_{y=0}^N \left(\frac{q}{N}\right)^y \sum_{x=0}^{N-y} \frac{(x+y)!}{x!y!} \frac{(N-2-x)! \gamma^x f^{N-y-x}}{(y-2)!(N-y-x)!}}. \quad (3.372)$$

Знаменатель в правой части выражения (3.372) есть полином N -й степени относительно переменной q , т.е.

$$P_0(q) = \lambda_N q^N + \lambda_{N-1} q^{N-1} + \dots + \lambda_1 q + \lambda_0, \quad (3.373)$$

где

$$\lambda_l = \frac{1}{\gamma^{N-1}} \frac{1}{N!} \sum_{x=0}^{N-l} \frac{(x+l)!}{x!l!} \frac{(N-2-x)! \gamma^x f^{N-l-x}}{(l-2)!(N-l-x)!}. \quad (3.374)$$

Тогда передаточная функция (3.372) может быть представлена в виде

$$W(q) = \frac{1}{\lambda_N q^N + \lambda_{N-1} q^{N-1} + \dots + \lambda_1 q + \lambda_0} = \frac{1}{P_0(q)}. \quad (3.375)$$

Оценка параметров N и f ячеечной модели с обратными потоками. Рассмотрим моменты функции отклика по ячеечной модели с обратными потоками. Значения моментов будем рассчитывать с помощью передаточной функции (3.375).

Начальный безразмерный момент первого порядка M_1^0 есть

$$M_1^0 = -W_q' \Big|_{q=0} = \frac{P_0'(q)}{\{P_0(q)\}^2} = \lambda_1 = 1. \quad (3.376)$$

Найдем второй начальный момент:

$$M_2^0 = W_q'' \Big|_{q=0} = \left(\frac{-P_0'}{P_0^2} \right)'_q = \frac{-P_0'' P_0^2 + 2(P_0')^2 P_0}{P_0^4} = 2(1 - \lambda_2), \quad (3.377)$$

где

$$\lambda_2 = \frac{1}{\gamma^{N-1} N^2} \sum_{x=0}^{N-2} \frac{(x+2)!}{x! 2} \frac{(N-2-x)! \gamma^x f^{N-2-x}}{(N-2-x)!}. \quad (3.378)$$

Третий начальный момент составляет

$$\begin{aligned} M_3^0 &= -W_q''' \Big|_{q=0} = - \left(\frac{2P_0(P_0')^2 - P_0'' P_0^2}{P_0^4} \right)'_q = \\ &= \frac{(2(P_0')^2 - P_0'' P_0) 3P_0^2 P_0'}{P_0^6} - \frac{(4P_0' P_0'' - P_0''' P_0 - P_0'' P_0') P_0^3}{P_0^6} \\ &= 6(\lambda_3 - 2\lambda_2 + 1), \end{aligned} \quad (3.379)$$

где

$$\lambda_3 = \frac{1}{\gamma^{N-1} N^3} \sum_{x=0}^{N-3} \frac{(x+3)!}{x! 3!} \frac{(N-2-x)! \gamma^x f^{N-3-x}}{(N-3-x)!}. \quad (3.380)$$

Уравнения (3.377) и (3.379) для моментов второго и третьего порядков содержат два искоемых параметра — число ячеек N и долю обратного потока f . Решение этих уравнений позволяет определить параметры N и f . Для этого по экспериментальным данным определяют моменты M_2^0 , M_3^0 и далее решают два нелинейных уравнения (3.377), (3.379) относительно неизвестных N и f . На рис. 3.24, 3.25 изображены зависимости второго и третьего начальных моментов от числа ячеек N и доли обратного потока f .

Если положить $x = f/(1+f)$, то уравнения (3.377), (3.379) можно представить в виде

$$M_2^0 = 1 + \frac{N(1-x^2) - 2x(1-x^N)}{N^2(1-x)^2}, \quad (3.381)$$

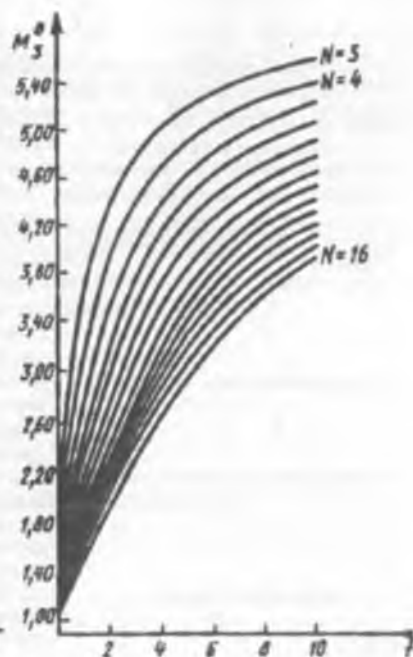
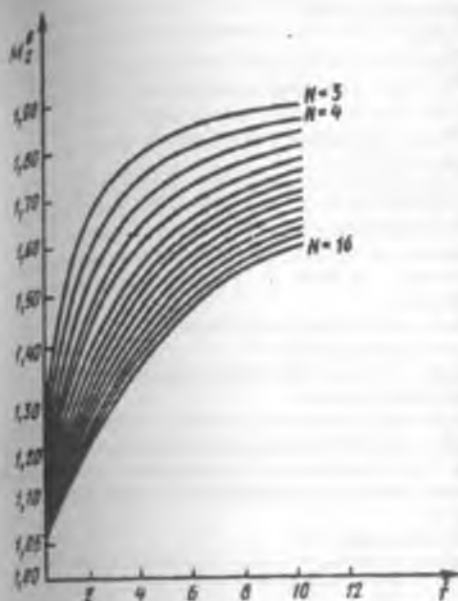


Рис. 3.24. Зависимость второго начального момента M_2^0 от числа ячеек N и доли обратного потока f

Рис. 3.25. Зависимость третьего начального момента M_3^0 от числа ячеек N и доли обратного потока f

$$M_3^0 = 1 + \frac{2}{N^2} + \frac{6x(1 + 3x^N) + 3N(1 - x^2)}{N^2(1 - x)^2} - \frac{12x(1 + x)(1 - x^N)}{N^3(1 - x)^3}. \quad (3.382)$$

Значения параметров N и f определяются в результате совместного решения уравнений (3.381) и (3.382).

Связь между числом ячеек N , долей обратного потока f и дисперсией σ_0^2 имеет вид

$$\sigma_0^2 = \frac{1 + x}{N(1 - x)} - \frac{2x(1 - x^N)}{N^2(1 - x)^2} \quad (3.383)$$

Ячеечная модель с обратными потоками находят наибольшее применение для описания структуры потоков в насадочных и секционированных колонных аппаратах. В табл. 3.6 приведены области применения различных моделей.

Ориентировочные области применения различных моделей структуры потоков в аппарате

Наименование модели	Области применения
1. Модель идеального вытеснения	Трубчатые аппараты с отношением длины к диаметру свыше 20
2. Модель идеального перемешивания	Цилиндрические аппараты со сферическим днищем в условиях интенсивного перемешивания с отрезательными перегородками; барботажные аппараты с близкими размерами диаметра и высоты в условиях интенсивного барботажа
3. Ячеечная модель	Каскады реакторов с мешалками; тарельчатые колонны; аппараты с псевдоожиженными слоями; насадочные колонны
4. Рециркуляционная модель	Тарельчатые, секционированные насадочные аппараты, где наблюдается заброс вещества в сторону, противоположную направлению основного потока (например, пульсационные колонные аппараты)
5. Диффузионная модель	Трубчатые аппараты; аппараты колонного типа с насадкой и без насадки при осевом рассеивании вещества

§ 3.7. Комбинированные модели

При характеристике движения реальных потоков может оказаться, что ни одна из перечисленных гидродинамических моделей не дает возможности достаточно точно воспроизвести свойства потока. В таких случаях применяют сложные комбинированные модели, построенные на основе приведенных выше простейших моделей с добавлением застойных зон, введением байпасирования и рециркуляции отдельных частей потоков. Математическое описание процесса при этом, естественно, усложняется, однако в результате удается получить необходимую точность воспроизведения свойств объекта моделирования.

При построении комбинированных моделей аппарат разбивают на ряд отдельных зон с различным механизмом и степенью перемешивания. Эти зоны могут соединяться последовательно или параллельно, могут быть как изолированными от окружающего пространства, так и взаимодействовать с соседними зонами. Обычно используют зоны со следующими моделями структуры потоков в этих зонах: модель идеального вытеснения, модель идеального смешения, диффузионная модель, застойные зоны. Общий поток разбивают на ряд последовательно-параллельных потоков. В модель могут включаться рециркулирующие и байпасирующие потоки.

Используя комбинированные модели, можно описать потоки произвольной сложности. При этом необходимо помнить, что усложнение модели затрудняет ее использование и, самое главное, модель должна отражать физическую сущность явления. Модель обязательно должна быть строго обоснована или экспериментально, или теоретически.

Рассмотрим влияние отдельных составляющих комбинированных моделей на функции отклика системы.

Застойные зоны. На практике встречаются два вида застойных зон: застойные зоны без обмена с основным потоком — "мертвые" зоны и зоны с обменом между ними и основным потоком. "Мертвые" застойные зоны легко определяются индикаторными методами из соотношения

$$\bar{t}_n = \frac{\int_0^{\infty} t C dt}{\int_0^{\infty} C dt} \neq \frac{V_n}{u}. \quad (3.384)$$

Среднее время пребывания в аппарате можно представить как

$$\frac{V_n}{u} = \frac{V_n + V_{zz}}{u} = \bar{t}_n + t_{zz}. \quad (3.385)$$

$$V_{zz} \neq V_n - \bar{t}_n u = u(t - \bar{t}_n), \quad (3.386)$$

где $\bar{t}_n$ — среднее время пребывания, определенное индикаторным методом; V_n , V_{zz} — объем всего аппарата, проточной и застойной зон; u — объемный расход потока; $t = V_0/u$.

При наличии обмена индикатором между проточной и застойной зонами возникает задача определения не только объема застойной зоны, но и эффективности обмена между проточной и застойной зонами. Характерным признаком наличия в аппарате застойных зон является затянутый во времени вид C - и F -кривых, длинные "хвосты".

Выведем уравнения моментов функции отклика на импульсное возмущение при наличии в аппарате застойных зон. В качестве примера возьмем ячеечную модель с обратными потоками. Путем трансформации ячейечной модели с обратными потоками при предельных значениях ее параметров в другие более простые модели можно найти моменты функции отклика и для этих моделей.

Запишем систему уравнений сохранения массы трассера для ячейечной модели с обратными потоками в проточной и застойной частях ячеек.

Первая ячейка

$$\alpha \frac{V_n}{N} \frac{dC_1}{dt} = eC_2 - (L + e)C_1 + L'C'_1 - L'C_1,$$

$$(1 + \alpha) \frac{V_n}{N} \frac{dC'_1}{dt} = L'C_1 - L'C'_1;$$

k -я ячейка ($1 \leq k < N$):

$$\begin{aligned} \alpha \frac{V_a}{N} \frac{dC_k}{dt} &= eC_{k+1} + (L + e)C_{k-1} - (L + 2e)C_k + V'C'_k - V'C_k, \\ (1 - \alpha) \frac{V_a}{N} \frac{dC'_k}{dt} &= V'C_k - V'C'_k; \end{aligned} \quad (3.387)$$

N -я ячейка:

$$\begin{aligned} \alpha \frac{V_a}{N} \frac{dC_N}{dt} &= (L + e)C_{N-1} - (L + e)C_N + L'C'_N - L'C_N, \\ (1 - \alpha) \frac{V_a}{N} \frac{dC'_N}{dt} &= V'C_N - V'C'_N, \end{aligned}$$

где $V_{ап} = V_{пр} + V_{зз}$ — полный объем аппарата, равный сумме проточной ($V_{пр}$) и застойной ($V_{зз}$) зон; $\alpha = V_{пр}/V_{ап}$ — доля объема проточных зон; V' — обменный поток между проточной и застойной зонами в ячейке.

Вводя безразмерные переменные $\theta = t/\tau$, $f = e/L$, $b = L'/L$, систему (3.387) можно представить в виде

$$\begin{aligned} \frac{\alpha}{N} \frac{dC_1}{d\theta} &= fC_2 - (1 + f)C_1 + b(C'_1 - C_1), \\ \frac{1 - \alpha}{N} \frac{dC'_1}{d\theta} &= b(C_1 - C'_1), \end{aligned} \quad (3.388)$$

$$\begin{aligned} \frac{\alpha}{N} \frac{dC_k}{d\theta} &= fC_{k+1} + (1 + f)C_{k-1} - (1 + 2f)C_k + b(C'_k - C_k), \\ \frac{1 - \alpha}{N} \frac{dC'_k}{d\theta} &= b(C_k - C'_k), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\alpha}{N} \frac{dC_N}{d\theta} &= (1 + f)C_{N-1} - (1 + f)C_N + b(C'_N - C_N), \\ \frac{1 - \alpha}{N} \frac{dC'_N}{d\theta} &= b(C_N - C'_N). \end{aligned}$$

При импульсном методе исследования структуры потоков в аппарате трассер вводят в начальное сечение колонного аппарата, т.е. в первую ячейку. При этом возможен ввод трассера как в проточную, так и в застойную зону. Начальные условия, соответствующие вводу в проточную зону первой ячейки, записываются в виде

$$C_1 = C_{1н}, \quad C'_1 = C_2 = C'_2 = \dots = C_N = C'_N = 0 \quad \text{при } t = 0. \quad (3.389)$$

Интегрируя систему уравнений (3.388) по θ от 0 до ∞ при начальных условиях (3.389) и сложив полученные уравнения, найдем

$$M_{0N} = 1; \quad M_{0,1} = M_{0,1}^* = \dots = M_{0,k} = M_{0,k}^* = 1. \quad (3.390)$$

умножив почленно уравнения (3.388) на θ^i ($i = 1, 2, \dots$) и вновь проинтегрировав их в области $0 \leq \theta < \infty$, получим следующую систему уравнений:

$$\begin{aligned} k=1: i \frac{1-a}{N} M_{i-1,1} &= (1+f) M_{i,1} - f M_{i,2} + b M_{i,1} - b M'_{i,1}, \\ i \frac{1-a}{N} M'_{i-1,1} &= b M'_{i,1} - b M_{i,1}, \\ \dots \dots \dots (3.391) \\ 1 < k < N: i \frac{1-a}{N} M_{i-1,k} &= (1+2f) M_{i,k} - f M_{i,k+1} - (1+f) M_{i,k-1} - \\ &- b M'_{i,k} + b M_{i,k}, \\ i \frac{1-a}{N} M'_{i-1,k} &= b M'_{i,k} - b M_{i,k}, \\ \dots \dots \dots \\ k=N: i \frac{1-a}{N} M_{i-1,N} &= (1+f) M_{i,N} - (1+f) M_{i,N-1} - b M'_{i,N} + b M_{i,N} \\ i \frac{1-a}{N} M'_{i-1,N} &= b M'_{i,N} - b M_{i,N}. \end{aligned}$$

Здесь начальный момент i -го порядка безразмерной S -кривой для проточной зоны k -й ячейки выражается формулой

$$M_{i,k} = \int_0^1 \theta^i C_k d\theta. \quad (3.392)$$

Соответственно начальный момент i -го порядка безразмерной S -кривой для застойной зоны k -й ячейки

$$M'_{i,k} = \int_0^1 \theta^i C'_k d\theta. \quad (3.393)$$

Суммируя уравнения (3.391), получаем

$$M_{i,N} = \frac{1}{N} \left[a \sum_{k=1}^N M_{i-1,k} + (1-a) \sum_{k=1}^N M'_{i-1,k} \right], \quad (3.394)$$

Связь между моментами S -кривых для проточной и застойной зон k -й ячейки выражается уравнением

$$M'_{i,k} = M_{i,k} + \frac{1}{N} \frac{1-a}{b} M'_{i-1,k}. \quad (3.395)$$

По уравнениям (3.391) – (3.394) можно определить различные моменты функции отклика. Так, первый начальный момент $M_{1,N}$ составляет

$$M_{1,N} = \frac{1}{N} \left[a \sum_{k=1}^N M_{0,k} + (1-a) \sum_{k=1}^N M'_{0,k} \right]. \quad (3.396)$$

Подставив в уравнение (3.396) значения $M_{0,k} = M'_{0,k} = 1$ из уравнения (3.390), получаем $M_{1,N} = 1$ при $b \neq 0$. Таким образом, первый началь-

ный момент распределения времени пребывания частиц потока в аппарате с застойными зонами и без них есть

$$M_{1,N} = M_{1,N}^0 = 1, \quad (3.397)$$

где индексом "0" обозначены моменты функции распределения моделей без застойных зон ($a = 1$).

Последовательно подставляя в уравнение (3.391) значения начальных моментов ячеек $N, N-1, N-2, \dots$, получим

$$M_{1,k} = M_{1,k}^0 = \frac{k-1}{N} + \frac{1-x^{N-k+1}}{N(1-x)}. \quad (3.398)$$

Для кривой отклика застойной зоны k -й ячейки на основании уравнения (3.395) имеем

$$M'_{1,k} = M_{1,k} + \frac{1-a}{Nb}, \quad (3.399)$$

С помощью уравнений (3.394), (3.398) и (3.399) находим выражение для второго начального момента функции распределения времени пребывания, т.е. С-кривой проточной зоны последней ячейки:

$$M_{2,N} = \frac{2}{N} \left[a \sum_1^N M_{1,k} + (1-a) \sum_{k=1}^N M'_{1,k} \right] = \frac{2}{N} \sum_1^N M_{1,k} + \frac{2(1-a)}{N} \sum_1^N \frac{1-a}{Nb}. \quad (3.400)$$

Так как

$$\frac{2}{N} \sum_1^N M_{1,k} = \frac{2}{N} \sum_1^N M_{1,k}^0 = M_{2,N}^0, \quad (3.401)$$

то

$$M_{2,N} = M_{2,N}^0 + \frac{2(1-a)^2}{Nb}. \quad (3.402)$$

С помощью выражений для $M_{1,N}$ и $M_{2,N}$ определяем дисперсию С-кривой проточной зоны последней ячейки:

$$\sigma_N^2 = M_{2,N} - M_{1,N}^2 = \sigma_N^{2^0} + \frac{2(1-a)^2}{Nb}. \quad (3.403)$$

Далее, используя уравнения (3.391), (3.395) и (3.402), находим

$$M'_{2,k} = M_{2,k} + \frac{2(1-a)}{Nb} M'_{1,k} = M_{2,k} + \frac{2(1-a)}{Nb} M_{1,k} + \frac{2(1-a)^2}{N^2 b^2}, \quad (3.404)$$

$$M_{2,k} = M_{2,k}^0 + \frac{2(1-a)^2}{Nb} M_{1,k}, \quad (3.405)$$

$$\sigma_k^2 = \sigma_k^{2^0} + \frac{2(1-a)^2}{Nb} M_{1,k}. \quad (3.406)$$

$$\sigma_k^2 = \sigma_k^2 + \left(\frac{1-a}{Nb} \right)^2. \quad (3.407)$$

Рассмотрим оценку параметров моделей с застойными зонами. При наличии лишь конвективного обмена между проточными и застойными зонами общий коэффициент обмена между проточными и застойными зонами K определяется как

$$K = \frac{NbL}{V_a} = \frac{NL'}{V_a}. \quad (3.408)$$

В этих условиях K представляет собой удельный (отнесенный к единице объема системы) конвективный поток между зонами.

В общем случае между проточными и застойными зонами аппарата помимо конвективного может происходить также диффузионный обмен. Общий обменный поток J между зонами k -й ячейки можно представить в виде

$$J = \frac{V_a}{N} K (C'_k - C_k). \quad (3.409)$$

Полученные выше зависимости, устанавливающие связь между моментами рециркуляционной модели с застойными зонами и без застойных зон и между характеристиками взаимодействия проточных и застойных зон, справедливы и для других моделей структуры потока с застойными зонами. Приняв в этих зависимостях $f=0$ (отсутствие обратных потоков), можно получить соответствующие выражения для моментов функций отклика ячеечной модели с застойными зонами.

При $f \rightarrow \infty$ и $N \rightarrow \infty$ выражения для $M_{i,k}$ трансформируются в уравнения моментов диффузионной модели с застойными зонами.

При $N \rightarrow \infty$ ячеечная модель с обратными потоками и застойными зонами переходит в модель идеального вытеснения с застойными зонами.

Все три параметра моделей с застойными зонами (в случае идеального вытеснения — два параметра), т.е. значения a , K и f (или Pe), можно определить экспериментально, фиксируя на выходе из аппарата две функции распределения времени пребывания: одну в проточной зоне и вторую — во всем сечении аппарата (по средней концентрации). Это осуществимо при использовании в качестве трассера радиоактивных изотопов.

Выражения для первых двух моментов распределения средней по сечению аппарата концентрации трассера ($C_{cp} = aC + (1-a)C'$) на выходе приведены в табл. 3.7.

Используя эти выражения, можно найти долю объема аппарата, занятую застойными зонами:

$$1-a = \frac{2(M_{1,cp} - 1)^2}{\sigma_{cp}^2 - \sigma_s^2 = 1 + (M_{1,cp} - 1)^2}, \quad (3.410)$$

и коэффициент обмена между проточными и застойными зонами:

Моменты С-кривой для различных моделей с застойными зонами

Явечная модель	Явечная модель с обратными потоками	Диффузионная модель	Модель идеального вытеснения
$M_1 = M_1^0 = 1$	$M_{1k} = \frac{k}{N} + \frac{V(1-x)^{N-k}}{N(1-x)} = M_{1k}^0$	$M_1 = M_1^0 = 1$	$M_1 = M_1^0 = 1$
$M_1' = 1 + \frac{(1-\alpha)U}{kV_a}$	$M_{1k}' = M_{1k}^0 + \frac{(1-\alpha)U}{kV_a}$	$M_1' = M_1 + \frac{(1-\alpha)U^*}{Lk}$	$M_1' = 1 + \frac{(1-\alpha)U^*}{Lk}$
$M_2 = 1 + \frac{1}{N} + \frac{2(1-\alpha)^2 U}{kV_a}$	$M_{2k} = M_{2k}^0 + \frac{2(1-\alpha)^2 U}{kV_a} \frac{M_{1k}}{M_{1k}^0}$	$M_2 = M_2^0 + \frac{2(1-\alpha)^2 U^*}{Lk} \frac{M_1}{M_1^0}$	$M_2 = 1 + \frac{2(1-\alpha)^2 U^*}{Lk}$
$M_2' = M_2 + \frac{2(1-\alpha)U}{kV_a} + 2 \left[\frac{(1-\alpha)U^2}{kV_a} \right]$	$M_{2k}' = M_{2k} + \frac{2(1-\alpha)U}{kV_a} \frac{M_{1k}}{M_{1k}^0} + 2 \left[\frac{(1-\alpha)U^2}{kV_a} \right]$	$M_2' = M_2 + \frac{2(1-\alpha)U^*}{Lk} \frac{M_1}{M_1^0} + 2 \left[\frac{(1-\alpha)U^{*2}}{Lk} \right]$	$M_2' = M_2 + \frac{2(1-\alpha)U^*}{Lk} + 2 \left[\frac{(1-\alpha)U^{*2}}{Lk} \right]$
$\sigma^2 = \frac{1}{N} + \frac{2(1-\alpha)^2 U}{kV_a}$	$\sigma_k^2 = \sigma_k^0 + \frac{2(1-\alpha)^2 U}{kV_a} \frac{M_{1k}}{M_{1k}^0}$	$\sigma^2 = \sigma^2 + \frac{2(1-\alpha)^2 U^*}{Lk} \frac{M_1}{M_1^0}$	$\sigma^2 = \frac{2(1-\alpha)^2 U^*}{Lk}$
$\sigma^2' = \sigma^2 + \left[\frac{(1-\alpha)U^2}{kV_a} \right]$	$\sigma_k^2' = \sigma_k^2 + \left[\frac{(1-\alpha)U^2}{kV_a} \right]$	$\sigma^2' = \sigma^2 + \left[\frac{(1-\alpha)U^{*2}}{Lk} \right]$	$\sigma^2' = \sigma^2 + \left[\frac{(1-\alpha)U^{*2}}{Lk} \right]$

$$K = \frac{(1-a)^2 L}{V_a (M_{1, \text{ср}} - 1)}, \quad (3.411)$$

где L — величина потока в прямом направлении.

Далее по дисперсии распределения времени пребывания $\sigma_{t=1}^2$ можно определить Pe или $x = f/(f+1)$.

Возможно определение параметров моделей с застойными зонами и по одной S -кривой, зафиксированной в проточной зоне какого-либо промежуточного сечения данного аппарата. Очевидно, в этом случае отпадает необходимость в применении радиоактивных изотопов. При этом параметры моделей определяют по первым трем моментам экспериментальной S -кривой. Так, по значению первого начального момента находят параметр, характеризующий интенсивность продольного перемешивания в проточной части аппарата, т.е. Pe или x . Затем по экспериментальным значениям второго и третьего центральных или начальных моментов определяют параметры a и K . В случае использования значений центральных моментов S -кривой для нахождения параметров a и K применяют формулы

$$a = \frac{3(\sigma^2 - \sigma^{2^0})^2}{2[\mu_3 - \mu_3^0 - 3\sigma^2(\sigma^2 - \sigma^{2^0})]}, \quad (3.412)$$

$$K = \frac{9M_1(\sigma^2 - \sigma^{2^0})\left(\frac{L}{V_a}\right)}{2[\mu_3 - \mu_3^0 - 3\sigma^2(\sigma^2 - \sigma^{2^0})]^2}, \quad (3.413)$$

где σ^{2^0} и μ_3^0 рассчитывают по соответствующим уравнениям для модели без застойных зон, подставляя значения Pe или x , найденные с помощью первого начального момента.

Проверку правильности расчета найденных параметров моделей (a , K и Pe или x) можно произвести по четвертому моменту. Для этого, подставив найденные значения параметров в уравнение для четвертого момента, вычисляют M_4 . Сопоставление вычисленного значения M_4 с найденным по экспериментальной S -кривой позволяет оценить точность полученных данных.

Байпасирование. На практике могут наблюдаться два вида байпасирования, как показано на рис. 3.26, а, б.

Пусть требуется определить долю байпасирующего потока по экспериментальным функциям отклика.

В случае, когда индикатор не попадает в байпасирующий поток, среднее время пребывания индикатора в аппарате составляет

$$\bar{t}_n = \frac{\int_0^{\infty} t C dt}{\int_0^{\infty} C dt} = \frac{V}{v_2} \quad (3.414)$$

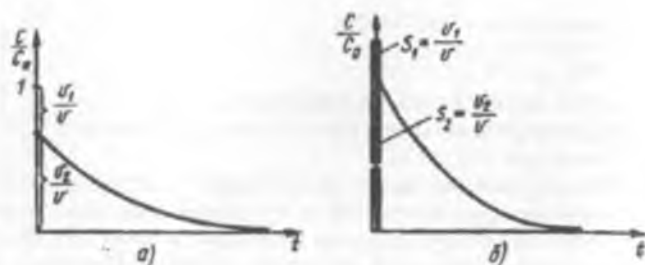


Рис. 3.26. Схема структуры потока с байпасом: а — индикатор не попадает в байпас; б — индикатор попадает в байпас

или

$$\bar{t}_n = \frac{V}{(1-a)v}, \quad (3.415)$$

где a — доля байпасирующего потока.

Если рабочий объем аппарата V известен или определен каким-либо другим методом, например методом "отсечки", то время пребывания потока в аппарате можно рассчитать, используя соотношение

$$\bar{t} = \frac{V}{v}. \quad (3.416)$$

Из соотношений (3.415), (3.416) получаем

$$\frac{\bar{t}}{\bar{t}_n} = 1 - a, \quad a = 1 - \frac{\bar{t}}{\bar{t}_n}. \quad (3.417)$$

Величины $\bar{t}$ и $\bar{t}_n$ определяют экспериментально и с помощью соотношения (3.417) вычисляют долю байпасирующего потока a .

Рассмотрим случай, когда индикатор попадает в байпасирующий поток, на примере аппарата полного смешения с байпасированием. В данном случае функция отклика системы при проведении исследования методом вымывания имеет вид, изображенный на рис. 3.27, а.

Количество байпасирующего потока и потока, проходящего через аппарат, легко определяется из графика, как видно из рис. 3.27, а. На практике начальные участки кривых могут быть размыты и поэтому лучше определять байпасирующий поток по всей кривой отклика.

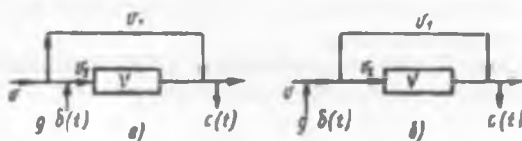


Рис. 3.27. Определение байпасирующего потока: а — методом вымывания; б — методом импульсного введения индикатора

Концентрация индикатора в потоке, выходящем из смесителя до смешения с байпасирующим потоком, определяется по формуле

$$C' = C_n e^{-\frac{v_2}{v} \bar{t}} \quad (3.418)$$

Уравнение баланса индикатора на выходе потока из аппарата имеет вид

$$vC = v_2 C' + v_1 C'', \quad (3.419)$$

где C'' — концентрация индикатора в байпасирующем потоке, равная нулю при $t > 0$ (так как используется метод вымывания). Тогда

$$C' = \frac{v}{v_2} C. \quad (3.420)$$

Подставляя значение C' в уравнение (3.418) и заменяя $\bar{t}$ на $\theta \frac{v}{v}$, получаем

$$\frac{C}{C_n} = \frac{v_2}{v} e^{-\frac{v_2}{v} \theta}. \quad (3.421)$$

Из зависимости (3.421), построенной в полулогарифмических координатах $\ln \frac{C}{C_n} \leftrightarrow \theta$, определяем $\frac{v_2}{v}$ как тангенс угла наклона.

При импульсном возмущении (рис. 3.27, б) часть индикатора, равная $\frac{v_1}{v}$, минуя аппарат, попадет на выход потока. Аналогично изложенному выше находим уравнение кривой:

$$\frac{C}{C_0} = \frac{v_2}{v} e^{-\frac{v_2}{v} \theta}, \quad (3.422)$$

где C_0 — действительная концентрация индикатора в аппарате при $t = 0$, определенная из расчета, что в аппарат попадет только часть индикатора, равная $\frac{v_2}{v}$. Эта величина неизвестна. Из условия баланса имеем

$$C_0 = \frac{v_2}{v} C_0, \quad (3.423)$$

где C_0 — концентрация индикатора, рассчитанная в предположении, что весь индикатор попал в смеситель. Итак, уравнение кривой имеет вид

$$\frac{C}{C_0} = \left(\frac{v_2}{v}\right)^2 e^{-\frac{v_2}{v} \theta}. \quad (3.424)$$

По уравнению (3.424) можно определить $\frac{v_2}{v}$.

Решкл. Рассмотрим явление рециркуляции потока с выхода на вход аппарата (рис. 3.28).

Найдем выражение для передаточной функции в данной системе. Уравнение материального баланса для узла S запишется в виде

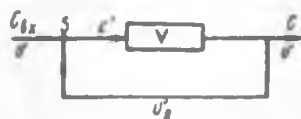


Рис. 3.28. Структура потоков в аппарате с рециркуляцией

$$uC_k + u_k C = (u + u_k) C' \quad (3.425)$$

Применив к уравнению (3.425) преобразование Лапласа, имеем

$$u + u_k \tilde{C} = (u + u_k) \tilde{C}', \quad (3.426)$$

где $\tilde{C}$ и $\tilde{C}'$ — преобразованные по Лапласу концентрации.

Обозначим отношение рециркуляционного потока u_k к основному u через R . Тогда, разделив последнее уравнение на uC , получаем следующее уравнение:

$$\frac{1}{\tilde{C}} + R = (1 + R) \frac{\tilde{C}'}{\tilde{C}} \quad (3.427)$$

Отношение $\tilde{C}/\tilde{C}'$ представляет собой передаточную функцию аппарата $W(p)$ без учета рецикла. Будем считать, что передаточная функция аппарата без рецикла $W(p)$ соответствует модели идеального смешения, т.е.

$$W(p) = \frac{1}{1 + \bar{t}p}, \quad (3.428)$$

где $\bar{t}$ — среднее время пребывания без учета рецикла.

Теперь уравнение (3.427) переписывается так:

$$\frac{1}{\tilde{C}} + R = (1 + R) (1 + \bar{t}p) \quad (3.429)$$

или

$$\tilde{C} = \frac{1}{1 + (1 + R) \bar{t}p} \quad (3.430)$$

Для импульсного возмущения на входе передаточная функция аппарата с рециклом $W_p(p)$ равна $\tilde{C}$. Следовательно,

$$W_p(p) = \frac{1}{1 + (1 + R) \bar{t}p} \quad (3.431)$$

Найдем среднее время пребывания $\bar{t}_p$ и дисперсию σ^2 функции отклика аппарата с рециклом, используя передаточную функцию (3.431). Первый начальный момент нормированной S -кривой есть

$$M_1' = \bar{t}_p = -W_p'(p=0). \quad (3.432)$$

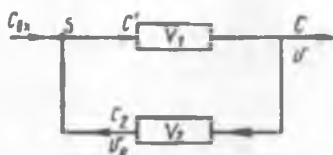
После дифференцирования выражения (3.431) получаем

$$\bar{t}_p = M_1' = (1 + R) \bar{t}. \quad (3.433)$$

Таким образом, среднее время пребывания в аппарате с рециклом $1 + R$ раз больше среднего времени пребывания в отсутствие рецикла.

Выразим второй начальный момент M_2' через передаточную функцию (3.431):

Рис. 3.29. Схема потоков в аппарате с рециркуляцией потока через объем



$$M_2' = W_p''(p=0) = 2(1+R)\bar{t}(1+R)\bar{t} = 2[(1+R)\bar{t}]^2. \quad (3.434)$$

Отсюда находим дисперсию

$$\sigma_\theta^2 = \frac{\mu_2'}{\bar{t}_p} - 1 = 1. \quad (3.435)$$

Рассмотрим теперь случай, когда рециркуляционный поток с выхода аппарата возвращается на вход через определенный объем V_2 (рис. 3.29).

Запишем уравнение материального баланса для узла s :

$$v_R C_2 + v C_{\text{вх}} = (v + v_R) C'. \quad (3.436)$$

Применим преобразование Лапласа к уравнению (3.436), считая, что концентрация на входе $C_{\text{вх}}$ соответствует импульсному возмущению. Имей

$$v_R \tilde{C}_2 + v = (v + v_R) \tilde{C}', \quad (3.437)$$

откуда, разделив на $\tilde{C}'$, получаем

$$\frac{1}{\tilde{C}'} + R \frac{\tilde{C}_2}{\tilde{C}'} = (1+R) \frac{\tilde{C}'}{\tilde{C}}, \quad (3.438)$$

где

$$R = \frac{v_R}{v}. \quad (3.439)$$

Отношение преобразованных по Лапласу концентраций $\tilde{C}_2/\tilde{C}'$ представляет собой передаточную функцию $W_2(p)$ объема V_2 , а отношение $\tilde{C}'/\tilde{C}$ — передаточную функцию $W_1(p)$ объема V_1 . Таким образом,

$$\frac{1}{\tilde{C}'} + R W_2(p) = \frac{(1+R)}{W_1(p)}. \quad (3.440)$$

Разрешая последнее уравнение относительно $\tilde{C}$, находим

$$\tilde{C} = \frac{W_1}{1 - R W_1 W_2 + R}. \quad (3.441)$$

Рассмотрим случай, когда в объемах V_1 и V_2 происходит полное смешение вещества. Тогда

$$W_1(p) = \frac{1}{1 + \bar{t}_1 p}, \quad (3.442)$$

$$W_2(p) = \frac{1}{1 + \bar{t}_2 p}. \quad (3.443)$$



Рис. 3.30. Параллельное соединение зон идеального смешения и идеального вытеснения

Здесь t_1, t_2 — среднее время пребывания в объемах V_1 и V_2 соответственно.

Подставим выражения (3.442), (3.443) в уравнение (3.441):

$$\tilde{C} = \frac{1}{(1+R)(1+\bar{t}_1 p) - \frac{R}{(1+\bar{t}_2 p)}} \quad (3.444)$$

Следовательно, если сигнал на входе соответствует импульсному возмущению, то передаточная функция рассматриваемой рециклической системы определяется выражением

$$W_p(p) = \tilde{C}p = \frac{1}{(1+R)(1+\bar{t}_1 p) - \frac{R}{(1+\bar{t}_2 p)}} \quad (3.445)$$

Оценим среднее время пребывания t_p и дисперсию σ_θ^2 функции отклика рециклической системы. Первый начальный момент функции отклика есть

$$M'_1 = \bar{t}_p = -W_p(p=0) = (1+R)\bar{t}_1 - (1-R)\bar{t}_2, \quad (3.446)$$

а дисперсия функции отклика σ_θ^2 , определяемая второй производной от передаточной функции $W_p''(p=0)$, составляет

$$\sigma_\theta^2 = \frac{2(1+R)(\bar{t}_2 - \bar{t}_1)[\bar{t}_1 + R(\bar{t}_2 - \bar{t}_1)]}{[(1+R)\bar{t}_1 - (1-R)\bar{t}_2]^2} - 1. \quad (3.447)$$

Комбинированные модели, составленные из параллельно соединенных зон. Рассмотрим в качестве примера параллельное соединение зон идеального смешения и идеального вытеснения (рис. 3.30).

Из условия материального баланса в точке z получаем

$$v_1 C_1 + v_2 C_2 = vC. \quad (3.448)$$

Поэтому концентрация на выходе составляет

$$C = \frac{v_1}{v} C_1 + \frac{v_2}{v} C_2. \quad (3.449)$$

Определим отклик системы на импульсное и ступенчатое возмущения. Из уравнения (3.449) следует, что такой отклик является суммой откликов модели идеального смешения и идеального вытеснения с коэффициентами v_1/v и v_2/v . На рис. 3.31 и 3.32 изображены кривые отклика на ступенчатое возмущение.

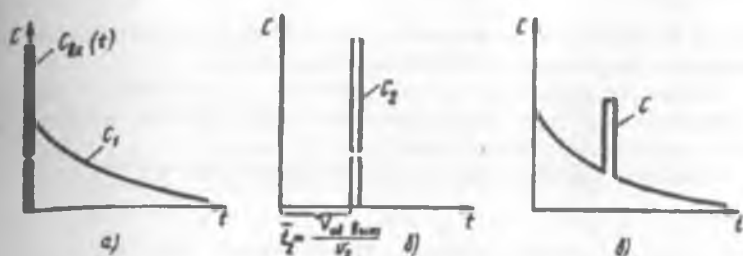


Рис. 3.31. Отклик системы, составленной из параллельно соединенных зон идеального смешения и идеального вытеснения на импульсное возмущение: а — отклик зоны идеального смешения; б — отклик зоны идеального вытеснения; в — отклик системы

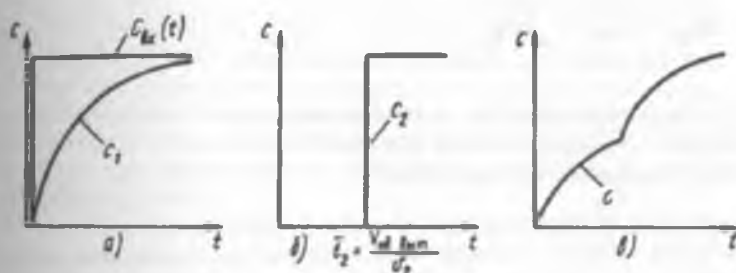


Рис. 3.32. Отклик системы, составленной из параллельно соединенных зон идеального смешения и идеального вытеснения на ступенчатое возмущение: а — отклик зоны идеального смешения; б — отклик зоны идеального вытеснения; в — отклик системы

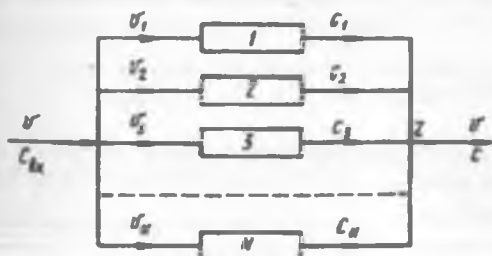


Рис. 3.33. Структура потоков в системе из параллельно соединенных зон

дартные возмущения системы, состоящей из параллельного соединения зон идеального смешения и идеального вытеснения.

Найдем передаточную функцию системы, составленной из параллельно соединенных зон. Пусть рассматриваемая система состоит из N зон, параллельно соединенных между собой (рис. 3.33).

Запишем уравнение материального баланса для узла z :

$$v_1 C_1 + v_2 C_2 + \dots + v_N C_N = vC, \quad (3.450)$$

откуда, обозначая $k_i = v_i/v$, получаем

$$\sum_{i=1}^N k_i C_i = C. \quad (3.451)$$

Применим к уравнению (3.451) преобразование Лапласа и разделим полученное уравнение на преобразованную по Лапласу входную концентрацию $\tilde{C}_{вх}$. Имеем

$$\sum_{i=1}^N k_i \frac{\tilde{C}_i}{\tilde{C}_{вх}} = \frac{\tilde{C}}{\tilde{C}_{вх}}. \quad (3.452)$$

Отношения $\tilde{C}_i/\tilde{C}_{вх}$ в левой части уравнения (3.452) представляют собой передаточные функции $W_i(p)$ соответствующих зон, а отношение $\tilde{C}/\tilde{C}_{вх}$ — передаточную функцию всей системы в целом, т.е. $W_c(p)$. Тогда получаем следующее соотношение между передаточной функцией системы и передаточными функциями отдельных зон:

$$W_c(p) = \sum_{i=1}^N k_i W_i(p). \quad (3.453)$$

Найдем среднее время пребывания в системе, составленной из параллельно соединенных зон. Используя выражение для передаточной функции системы, имеем

$$M_1^c = -W_c'(p=0) = -\sum_{i=1}^N k_i W_i'(p=0) = -\sum_{i=1}^N k_i M_{1i}^c, \quad (3.454)$$

где M_{1i}^c — первые начальные моменты отдельных зон системы.

Так как $M_{1i}^c = \bar{t}_i$ ($\bar{t}_i$ — среднее время пребывания в i -й зоне) и $M_1^c = \bar{t}_c$, то

$$\bar{t}_c = \sum_{i=1}^N k_i \bar{t}_i. \quad (3.455)$$

Определим дисперсию функции отклика системы, составленной из параллельно соединенных зон. Сначала найдем второй начальный момент функции отклика:

$$M_2^c = W_c''(p=0) = \sum_{i=1}^N k_i W_i''(p=0) = \sum_{i=1}^N k_i M_{2i}^c, \quad (3.456)$$

где M_{2i}^c — вторые начальные моменты функций отклика отдельных зон. Используя теперь связь безразмерной дисперсии σ^2 со вторым началь-

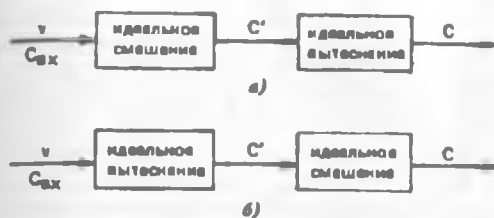


Рис. 3.34. Последовательное соединение зон идеального смешения и идеального вытеснения

ным моментом, выражаемую равенством

$$\sigma_0^2 = \frac{M_2^f}{\bar{t}_c^2} - 1, \quad (3.457)$$

получаем

$$\sigma_0^2 = \frac{\sum_{i=1}^N k_i M_{2i}^f}{\left(\sum_{i=1}^N k_i \bar{t}_i \right)^2} - 1. \quad (3.458)$$

Комбинированные модели, составленные из последовательно соединенных зон. Рассмотрим сначала комбинированные модели, составленные из последовательно соединенных зон идеального смешения и идеального вытеснения (рис. 3.34).

В такой комбинированной системе можно выделить два варианта соединения зон: сначала расположена зона смешения, а затем вытеснения (рис. 3.34, а), и наоборот (рис. 3.34, б). Как влияет порядок соединения зон на отклик системы на стандартные возмущения? Рассмотрим этот вопрос на примере ступенчатого возмущения. Функции отклика зон в случае ступенчатого возмущения для схем, приведенных на рис. 3.34, а, б, изображены соответственно на рис. 3.35, а, б. Из этого рисунка видно, что в данном случае отклик системы один и тот же и, следовательно, порядок соединения зон безразличен.

Справедлив ли сделанный вывод для всех случаев? Чтобы ответить на этот вопрос, рассмотрим следующий пример. Пусть в данной системе протекает реакция $A \xrightarrow{k} B$ с линейной кинетикой (концентрацию вещества А обозначим через C). Скорость такой реакции определяется следующим образом:

$$\frac{dC}{dt} = -kC \quad (3.459)$$

Сравним концентрации на выходе для схем, изображенных на рис. 3.34 а, б. Рассмотрим схему на рис. 3.34, а. Для зоны идеального смешения имеем

$$v(C' - C_{вх}) = V_{см} \frac{dC'}{dt}, \quad (3.460)$$

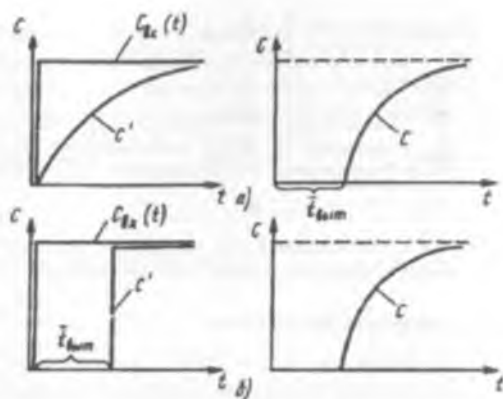


Рис. 3.35. Функция отклика системы при нанесении ступенчатого возмущения для схем, изображенных на рис. 3.34, а, б

где $V_{см}$ — объем зоны идеального смешения. Отсюда

$$v(C_{вх} - C') = V_{см} k C' \quad (3.461)$$

Значит, концентрация на выходе из зоны идеального смешения составляет

$$C' = \frac{C_{вх}}{1 + k \bar{t}_{см}} \quad (3.462)$$

где $\bar{t}_{см} = \frac{V_{см}}{v}$ — среднее время пребывания в зоне идеального смешения.

В зоне идеального вытеснения изменение концентрации описывается уравнением

$$u \frac{dC}{dx} = -kC, \quad (3.463)$$

где $u = v/s$ — скорость движения потока; s — площадь поперечного сечения зоны вытеснения.

Интегрируя уравнение (3.463) в пределах от C' до C по концентрации и от 0 до l по координате x (l — длина зоны вытеснения), получаем

$$C = C' e^{-k \bar{t}_{выт}} \quad (3.464)$$

Концентрация C' на входе в зону идеального вытеснения определен выражением (3.462). Итак, концентрация C на выходе схемы (рис. 3.34, а) последовательного соединения зон смешения и вытеснения выражается формулой

$$C = \frac{C_{вх} e^{-k \bar{t}_{выт}}}{1 + k \bar{t}_{см}} \quad (3.465)$$

Рассмотрим схему на рис. 3.34, б. Здесь концентрация C' в зоне вытеснения определяется уравнением

$$u \frac{dC'}{dx} = -kC' \quad (3.466)$$

или $C' = C_{вх} e^{-k\bar{t}_{выт}}$ (3.467)

В зоне смешения изменение концентрации составляет

$$v(C' - C) = V_{см} kC \quad (3.468)$$

Подставляя в последнее уравнение выражение (3.467), получаем концентрацию C на выходе из схемы (б) последовательного соединения зон вытеснения и смешения:

$$C = \frac{C_{вх} e^{-k\bar{t}_{выт}}}{1 + k\bar{t}_{см}} \quad (3.469)$$

Таким образом, для линейной кинетики протекания процесса концентрации на выходе из системы в случае схем, изображенных на рис. 3.34, а, б, одна и та же и, следовательно, порядок соединения зон смешения и вытеснения не оказывает влияния на протекание процесса.

Рассмотрим влияние порядка соединения зон смешения и вытеснения в случае, когда в системе протекает процесс с нелинейной кинетикой: $A + A \xrightarrow{k} B$. Скорость протекания такого химического превращения определяется выражением

$$\frac{dC}{dt} = -kC^2 \quad (3.470)$$

Найдем концентрацию вещества на выходе по схеме соединения, изображенной на рис. 3.34, а. Для зоны идеального смешения имеем

$$v(C_{вх} - C') = V_{см} k(C')^2 \quad (3.471)$$

Отсюда

$$C' = \frac{\sqrt{1 + 4\bar{t}_{см} k C_{вх}} - 1}{2\bar{t}_{см} k} \quad (3.472)$$

Изменение концентрации в зоне идеального вытеснения определяется уравнением

$$u \frac{dC}{dx} = -kC^2 \quad (3.473)$$

Интегрирование уравнения (3.473) даст

$$\frac{1}{C} = \frac{1}{C'} + k\bar{t}_{выт} \quad (3.474)$$

Подставляя в (3.474) выражение (3.472), находим концентрацию на выходе из системы:

$$C = \frac{2\bar{t}_{\text{см}} k}{\sqrt{1 + 4\bar{t}_{\text{см}} k C_{\text{вх}} + 2k^2 \bar{t}_{\text{выт}} \bar{t}_{\text{см}} - 1}} \quad (3.475)$$

Для схемы, изображенной на рис. 3.34, б, концентрация вещества на выходе из зоны идеального вытеснения есть

$$u \frac{dC}{dx} = -kC^2 \quad (3.476)$$

или после интегрирования

$$C' = \frac{C_{\text{вх}}}{1 + k\bar{t}_{\text{выт}} C_{\text{вх}}} \quad (3.477)$$

В зоне идеального смешения концентрация определяется следующим уравнением:

$$v(C' - C) = V_{\text{см}} k C^2 \quad (3.478)$$

Отсюда после подстановки выражения (3.477) получаем

$$C = \frac{\sqrt{1 + 4\bar{t}_{\text{см}} k C_{\text{вх}} / (1 + k\bar{t}_{\text{выт}} C_{\text{вх}})} - 1}{2\bar{t}_{\text{см}} k} \quad (3.479)$$

Нетрудно убедиться, что выражения (3.475), (3.479) для выходных концентраций по схемам, изображенным на рис. 3.34, а, б, дают различные значения. Следовательно, в нелинейном случае порядок соединения зон смешения и вытеснения оказывает влияние на протекание процесса.

Рассмотрим передаточную функцию системы, составленной из последовательно соединенных зон. Пусть система включает N зон, последовательно соединенных между собой. Тогда в соответствии с определением передаточной функции W_c можно записать

$$W_c(p) = \frac{\tilde{C}_N}{\tilde{C}_{\text{вх}}} \quad (3.480)$$

где $\tilde{C}_N$, $\tilde{C}_{\text{вх}}$ — соответственно выходная и входная концентрации, преобразованные по Лапласу.

Умножив и разделив правую часть последнего равенства на $\tilde{C}_{N-1}$, получаем

$$W_c(p) = \frac{\tilde{C}_N}{\tilde{C}_{N-1}} \cdot \frac{\tilde{C}_{N-1}}{\tilde{C}_{\text{вх}}} \quad (3.481)$$

Аналогично, умножив и разделив правую часть уравнения (3.481) на $\tilde{C}_{N-2} \tilde{C}_{N-3} \dots \tilde{C}_1$, приходим к следующему уравнению:

$$W_c(p) = \frac{\tilde{C}_N}{\tilde{C}_{N-1}} \cdot \frac{\tilde{C}_{N-1}}{\tilde{C}_{N-2}} \cdot \frac{\tilde{C}_{N-2}}{\tilde{C}_{\text{вх}}} \quad (3.482)$$

Сомножители $\tilde{C}_i / \tilde{C}_{i-1}$ ($i = 1, 2, \dots, N$) представляют собой не что иное,

как передаточные функции отдельных зон. Тогда уравнение (3.482) можно записать в виде

$$W_c(p) = W_N(p) W_{N-1}(p) \dots W_1(p) = \prod_{j=1}^N W_j(p), \quad (3.483)$$

Итак, согласно полученному соотношению (3.483), передаточная функция системы $W_c(p)$ из последовательно соединенных зон равна произведению передаточных функций $W_j(p)$ отдельных зон.

Определим среднее время пребывания $\bar{t}_c$ в системе, составленной из последовательно соединенных зон. Для этого воспользуемся передаточной функцией системы $W_c(p)$ (см. уравнение (3.483)). Пусть $N = 2$. Тогда

$$W_c(p) = W_1(p) W_2(p) \quad (3.484)$$

и первый начальный момент M_1 системы есть

$$M_1 = -W'_c(p=0) = -W'_1 W_2 - W_1 W'_2. \quad (3.485)$$

Так как при $p=0$ $W_1 = W_2 = 1$ и $W'_1 = -M_{11}$, $W'_2 = -M_{12}$ (здесь M_{11} и M_{12} — первые начальные моменты первой и второй зон соответственно), то

$$M_1 = M_{11} + M_{12}. \quad (3.486)$$

Рассматривая аналогично случаи $N = 3, 4, \dots$, получаем следующую формулу для среднего времени пребывания в системе:

$$\bar{t}_c = \sum_{i=1}^N \bar{t}_i \quad (3.487)$$

Найдем теперь дисперсию функции отклика системы, составленной из последовательно соединенных зон. Аналогично предыдущему будем использовать передаточную функцию системы (3.483). Рассмотрим случай $N = 2$. Тогда второй начальный момент есть

$$M_2 = W''_c(p=0) = W''_1 W_2 + 2 W'_1 W'_2 + W_1 W''_2. \quad (3.488)$$

Так как $W_i(p=0) = 1$, а $W'_i(p=0) = -M_{1i}$, то

$$M_2 = M_{21} + 2M_{11}M_{12} + M_{22}. \quad (3.489)$$

Отсюда находим дисперсию функции отклика системы:

$$\sigma_t^2 = M_2 - \bar{t}_c^2 = (M_{21} - \bar{t}_1^2) + (M_{22} - \bar{t}_2^2) = \sigma_{t_1}^2 + \sigma_{t_2}^2, \quad (3.490)$$

где $\sigma_{t_1}^2, \sigma_{t_2}^2$ — дисперсии функции отклика составляющих зон.

Аналогично рассматривая случаи $N = 3, 4, \dots$, получаем следующее соотношение для дисперсии функции отклика системы из N зон:

$$\sigma_t^2 = \sum_{i=1}^N \sigma_{t_i}^2. \quad (3.491)$$

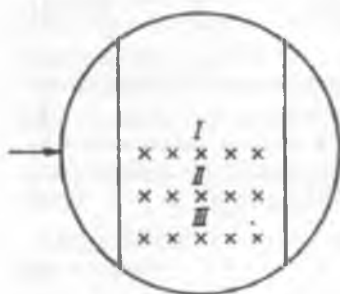


Рис. 3.36. Расположение точек замера концентрации индикатора на поверхности тарелки

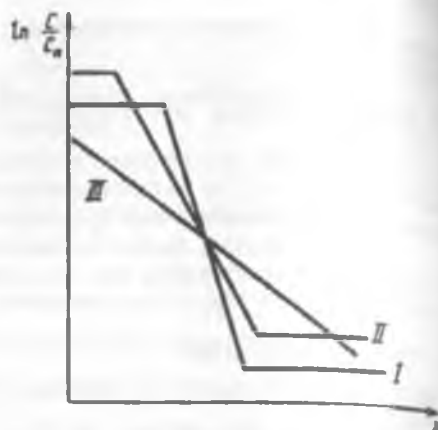


Рис. 3.37. Изменение концентрации индикатора по длине тарелки

Соответственно безразмерная дисперсия есть

$$\sigma_{\theta}^2 = \frac{\sum_{i=1}^N \sigma_{\theta i}^2}{\left(\sum_{i=1}^N \bar{r}_i \right)^2} \quad (3.492)$$

Пример. Исследовали структуру потока жидкости на барботающих массообменных тарелках. Сначала использовали метод установившегося состояния: индикатор подавали на выходе потока жидкости с тарелки равномерно по сечению и определяли распределение концентрации индикатора в различных точках по длине тарелки. Расположение точек замера концентрации изображено на рис. 3.36.

Предварительные опыты показали, что структура потока симметрична относительно центральной оси, поэтому анализ проводили на одной половине тарелки. Типичное распределение концентрации индикатора на тарелке изображено на рис. 3.37, где в полулогарифмических координатах показана зависимость концентрации от расстояния для различных сечений.

Из рассмотрения рисунка можно сделать следующие выводы. Степень перемешивания изменяется по длине и сечению аппарата. В зонах, расположенных у приемной и сливной перегородок, наблюдается полное перемешивание жидкости — концентрация не изменяется по длине тарелки. В центральной зоне зависимость концентрации индикатора от расстояния в полулогарифмических координатах выражается прямой линией. В этом случае структура потока может быть описана диффузионной моделью и величина Pe определяется тангенсом угла наклона этой прямой (уравнение (3.30)). Величина критерия Пекле (тангенс угла наклона) изменяется вдоль сечения аппарата. Таким образом, комбинированная модель должна

исключить зоны идеального перемешивания и зоны, описываемые уравнением диффузионной модели. Размеры зон и величина Pe для различных зон могут быть определены из графиков, представленных на рис. 3.37. Далее были проведены исследования импульсным методом (индикатор вводился мгновенно на входе потока и определяли S -кривые на выходе потока из аппарата, при этом измеряли среднюю концентрацию в выходном потоке) и методом отсечки находили количество жидкости на тарелке. По количеству жидкости на тарелке определяли среднее время пребывания $\bar{t} = V/u$. Среднее время пребывания определяли также по эксперименталь-

ным S -кривым $\bar{t}_H = \frac{\int_0^\infty t C dt}{\int_0^\infty C dt}$. Было обнаружено, что $\bar{t} \neq \bar{t}_H$. Визуальными

наблюдениями было установлено, что часть потока движется по дну тарелки и вблизи стенок в виде незаэрированной жидкости, т.е. имело место байпасирование части жидкости. Использование результатов исследований, полученных импульсным методом и методом отсечки, позволяет оценить долю байпасирующего потока α .

Визуальными наблюдениями было также установлено, что часть потока возвращается от сливной перегородки к входной, т.е. имеет место рециркуляция. Рециркуляция наблюдается в основном вблизи стенок аппарата.

Таким образом, структура потока жидкости по тарелке должна описываться комбинированной моделью, включающей последовательно-параллельное соединение зон идеального смешения, диффузионных зон, байпасирующего и рециркулирующего потоков. Размеры зон, величина Pe определяются методом установившегося состояния. Величина байпасирующего потока определяется по уравнению (3.417). Остается неизвестной

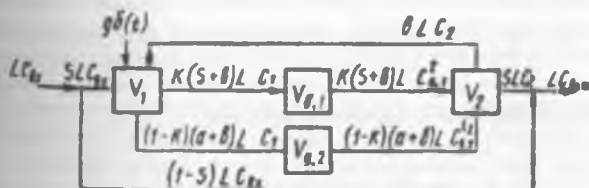


Рис. 3.38. Структурная схема комбинированной модели потока жидкости на тарелке: L — общий объемный расход жидкости; θ — доля потока жидкости, проходящей по тарелке; α — доля рециркулирующего потока; k — доля потока, проходящего через среднюю зону тарелки; V_1 , V_2 — объемы жидкостей полного перемешивания; V_{d1} , V_{d2} — объемы диффузионных зон; i_1 , i_2 — длины диффузионных зон; C_1 , C_2 — концентрации индикатора в соответствующих зонах полного перемешивания; $C_{вых}$ — концентрация индикатора на выходе потока из диффузионных зон

величина рециркулирующего потока. Ниже будет показано, как можно найти эту величину.

Блок-схема комбинированной модели изображена на рис. 3.38.

Уравнения комбинированной модели включают уравнения конвективной диффузии в диффузионных зонах:

$$\frac{\partial^2 C_{д1}}{\partial x_1^2} - \frac{k(s+b)L}{D_{11}F_1} \frac{\partial C_{д1}}{\partial x_1} = \frac{1}{D_{11}} \frac{\partial C_{д1}}{\partial t}, \quad (3.493)$$

$$\frac{\partial^2 C_{д2}}{\partial x_2^2} - \frac{(1-k)(s+b)L}{D_{12}F_2} \frac{\partial C_{д2}}{\partial x_2} = \frac{1}{D_{12}} \frac{\partial C_{д2}}{\partial t}, \quad (3.494)$$

где $C_{д1}$, $C_{д2}$ — концентрация индикатора в соответствующих диффузионных зонах; D_{11} , D_{12} — коэффициенты продольного перемешивания; F_1 , F_2 — сечения потока в соответствующих зонах.

Материальный баланс, составленный для ячеек полного перемешивания, имеет вид

$$sLC_{вх} + D\delta(t) + bLC_2 = k(s+b)LC_1 + (1-k)(s+b)LC_1 + V_1 \frac{dC_1}{dt}. \quad (3.495)$$

$$k(s+b)LC_{д1}^{l_1} + (1-k)(s+b)LC_{д2}^{l_2} = sLC_2 + V_2 \frac{dC_2}{dt}, \quad (3.496)$$

где $C_{д1}^{l_1}$, $C_{д2}^{l_2}$ — концентрация индикатора на выходе потока из соответствующих зон.

Материальный баланс индикатора на выходе потока из аппарата имеет вид

$$sLC_2 + (1-s)LC_{вх} = LC_{вых}. \quad (3.497)$$

Система уравнений (3.493)–(3.497) является математической моделью комбинированной структуры потока, схема которого изображена на рис. 3.38.

Для решения уравнений (3.493), (3.494) необходимо знать граничные условия. Из материального баланса, составленного на границах диффузионных зон, получаем следующие граничные условия:

при $x_1 = x_2 = 0$:

$$k(s+b)LC_1 + D_{11}F_1 \frac{dC_{д1}}{dx_1} = k(s+b)LC_{д1}, \quad (3.498)$$

$$(1-k)(s+b)LC_1 + D_{12}F_2 \frac{dC_{д2}}{dx_2} = (1-k)(s+b)LC_{д2}, \quad (3.499)$$

при $x_1 = l_1$, $x_2 = l_2$:

$$\frac{dC_{д1}}{dx_1} = 0, \quad \frac{dC_{д2}}{dx_2} = 0. \quad (3.500)$$

Решая систему уравнений (3.493)–(3.497) с граничными условиями (3.498)–(3.500) относительно моментных характеристик (аналогично по-

как это было сделано при рассмотрении диффузионной модели), можно получить уравнение связи между экспериментальными характеристиками функции отклика и параметрами модели.

В частности, зависимость между безразмерной дисперсией и параметрами модели имеет вид

$$\sigma_{\theta}^2 = \frac{1}{1+R} \left\{ \frac{\xi_3^2}{k} \left[1 + \frac{2}{Pe_1} - \frac{2}{Pe_1^2} (1 - e^{-Pe_1}) \right] + \right. \\ \left. + \frac{\xi_4}{(1+k)} \left[1 + \frac{2}{Pe_2} - \frac{2}{Pe_2^2} (1 - e^{-Pe_2}) \right] + 2(1 - \xi_2)(R + \xi_1) \right\} + 2\xi_2 - 1 \quad (3.501)$$

или

$$\sigma_{\theta}^2 = \frac{1}{1+R} \left\{ \frac{\xi_3^2}{k} (1 + \sigma_{d1}^2) + \frac{\xi_4^2}{1-k} (1 + \sigma_{d2}^2) + 2(1 - \xi_2)(R + \xi_1) \right\} + 2\xi_2 - 1, \quad (3.502)$$

где $\xi_1 = \frac{V_1}{V_{ан}}$, $\xi_2 = \frac{V_2}{V_{ан}}$, $\xi_3 = \frac{V_{д1}}{V_{ан}}$, $\xi_4 = \frac{V_{д2}}{V_{ан}}$; $R = b/\tau$ — коэффициент рециркуляции; σ_{d1}^2 , σ_{d2}^2 — дисперсии соответствующих диффузионных зон.

Как уже отмечалось, размеры всех зон и величины Pe соответствующих зон определяются методом установившегося состояния, величина байпасирующего потока определяется по уравнению (3.417).

Подставив полученные значения всех этих параметров в уравнение (3.502), получим связь между дисперсией и коэффициентом рециркуляции.

Таким образом, структура комбинированной модели и параметры модели определяются комплексом экспериментальных методик.

§ 3.8. Оценка структуры потоков в аппарате с помощью λ - и κ -функций

Для оценки неравномерности потоков в аппаратах используют функции распределения, каждая из которых является результатом установления однозначного соответствия между произвольной частицей потока и некоторым характерным для нее промежутком времени.

Распределение частиц потока по времени пребывания в аппарате характеризуется функцией $F(t)$, обладающей следующим свойством: доля частиц, пребывающих в аппарате в течение времени, равного t или меньшего t , есть $F(t)$. Доля частиц, для которых время пребывания превышает t , выражается в виде дополняющей функции

$$F^*(t) = 1 - F(t). \quad (3.503)$$

Функция $F(t)$ является неубывающей функцией t , которая принимает нулевое значение при $t = 0$ и асимптотически приближается к единице при

$t \rightarrow \infty$. Дополняющая функция $F^*(t)$ представляет собой невозрастающую функцию, которая равна единице при $t = 0$ и асимптотически стремится к нулю при возрастании времени. Таким образом, $F(t)$ есть вероятность того, что для данной частицы потока время пребывания в аппарате не превосходит t , а $F^*(t)$ — что вероятность времени пребывания превосходит t .

Дифференцирование функции распределения вероятности $F(t)$ по t дает функцию плотности распределения вероятности:

$$Q(t) = \frac{dF(t)}{dt} = - \frac{dF^*(t)}{dt}. \quad (3.504)$$

Следовательно, вероятность того, что время пребывания данной частицы в аппарате заключено между t и $t + dt$, равна $Q(t)dt$.

Функции $Q(t)$, $F(t)$, $F^*(t)$ являются характеристиками распределения времени пребывания частиц на выходе системы, причем $Q(t)$ есть внешняя функция плотности распределения возрастов.

Для характеристики частиц, находящихся внутри системы, вводят понятие возраста частицы t^* , который определяется отрезком времени, прошедшим с момента входа частицы в аппарат. Аналогично, функции распределения времени пребывания функцию распределения элементов системы по возрастам $B(t)$ определяют как долю частиц системы, возраст которых t^* на данный момент времени t меньше, чем t . Функция плотности распределения частиц по возрастам $b(t)$ определяется как

$$b(t) = \frac{dB(t)}{dt} \quad (3.505)$$

и, значит, $b(t)dt$ есть вероятность того, что частица внутри системы пребывает в аппарате в течение времени от t до $t + dt$. Функция $b(t)$ называется *внутренней функцией распределения частиц потока по возрастам пребывания* и ее принято обозначать $I(t)$.

Наряду с функцией распределения элементов потока по возрастам пребывания эффективным средством выявления в потоках различных неоднородностей типа застойных зон, байпаса, рецикла являются функции интенсивности.

Рассмотрим поток случайных событий, удовлетворяющий следующим условиям: вероятность одновременного наступления более одного события пренебрежимо мала по сравнению с вероятностью наступления одного события (гипотеза ординарности); вероятность наступления k событий в течение промежутка времени $(t, t + \Delta t)$ не зависит от того, сколько событий наступило до момента времени t (гипотеза отсутствия последействия); вероятность наступления определенного числа событий на данном промежутке времени зависит не только от длины промежутка, но и от его положения на оси времени (гипотеза нестационарности потока). Основной числовой характеристикой такого потока является *мгновенная плотность* (или *интенсивность потока*), т.е. предел отношения среднего числа событий на участке времени $(t, t + \Delta t)$ к длине этого участка, когда последний стремится к нулю:

$$\lambda(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{m(t + \Delta t) - m(t)}{\Delta t} = \frac{dm(t)}{dt}, \quad (3.506)$$

где $m(t)$ — математическое ожидание числа событий на участке $(0, t)$.

Определенный таким образом поток случайных событий называется **нестационарным пуассоновским потоком**. Для такого потока число событий, наступающих на участке (t_0, t) , подчиняется закону Пуассона:

$$P_k(t_0, t) = \frac{a_{t_0, t}^k}{k!} \exp(-a_{t_0, t}) \quad (k = 0, 1, 2, \dots), \quad (3.507)$$

где $P_k(t_0, t)$ — вероятность наступления k событий на интервале (t_0, t) ;

$a_{t_0, t}$ — математическое ожидание числа событий на этом интервале, равное

$$a_{t_0, t} = \int_{t_0}^{t_0+t} \lambda(\xi) d\xi. \quad (3.508)$$

Отметим, что для нестационарного пуассоновского потока величина $a_{t_0, t}$ зависит не только от длины промежутка (t_0, t) , но и от его положения в оси времени.

Теперь для нестационарного пуассоновского потока найдем закон распределения промежутка времени τ между соседними событиями. Пусть первое из соседних событий наступило в момент t_0 . Искомый закон распределения $F_{t_0}(\tau)$ есть вероятность того, что следующее событие наступит до момента t :

$$F_{t_0}(\tau) = P(\tau < t). \quad (3.509)$$

Пусть $P(\tau > t)$ — вероятность того, что на интервале от t_0 до $t_0 + t$ не появится ни одного события. Тогда последнее соотношение можно представить в виде

$$F_{t_0}(\tau) = P(\tau < t) = 1 - P(\tau > t). \quad (3.510)$$

Для подсчета $P(\tau > t)$ можно воспользоваться законом Пуассона при $t_0 = 0$:

$$P(\tau > t) = \exp(-a_{t_0, t}) = \exp\left(-\int_{t_0}^{t_0+t} \lambda(\xi) d\xi\right). \quad (3.511)$$

Отсюда находим

$$F_{t_0}(\tau) = 1 - \exp\left(-\int_{t_0}^{t_0+t} \lambda(\xi) d\xi\right). \quad (3.512)$$

Дифференцируя это равенство, получаем плотность функции распределения

$$p(t) = \lambda(t_0 + t) \exp\left(-\int_{t_0}^{t_0+t} \lambda(\xi) d\xi\right); \quad (3.513)$$

при $t_0 = 0$ имеем

$$p(t) = \lambda(t) \exp \left(- \int_0^t \lambda(\xi) d\xi \right). \quad (3.514)$$

Покажем теперь, что полученное выражение для плотности функции распределения пуассоновского потока в точности совпадает с функцией распределения времени пребывания потока в аппарате, равной $C(t)$. Допустим, что в момент $t = 0$ все частицы в поперечном сечении потока жидкости или газа на входе в аппарат удалось каким-либо способом пометить. По физическому смыслу поток случайных событий, состоящий в появлении помеченных частиц на выходе из аппарата, удовлетворяет всем перечисленным гипотезам (ординарности, отсутствия последствий, нестационарности). Доля частиц возраста $\bar{t}$, которые покидают аппарат в течение промежутка времени $(t, t + dt)$, равна $\lambda(t) dt$, где $\lambda(t)$ — функция интенсивности рассматриваемого потока. Составим уравнение материального баланса для частиц, покидающих аппарат. С одной стороны, по смыслу С-кривой доля частиц на выходе из аппарата, возраст которых заключен между t и $t + dt$, равна $C(t)dt$ или, в объемных единицах, $vC(t)dt$ (v — объемный расход среды через аппарат). С другой стороны, то же количество равно количеству потока $V_A I(t)$, которое не покинуло систему до момента t (V_A — объем аппарата), умноженному на долю потока возраста t , которая покинет аппарат в течение следующего промежутка времени $(t, t + dt)$, равную $\lambda(t)dt$. Таким образом, получаем соотношение

$$vC(t) dt = V_A I(t) \lambda(t) dt. \quad (3.515)$$

Отсюда

$$\lambda(t) = \frac{C(t)}{I(t)} = - \frac{d}{dt} \ln(I(t)), \quad (3.516)$$

где $\bar{t} = \frac{V_A}{v}$.

Интегрируя, приходим к равенству, аналогичному ранее найденному выражению для плотности функции распределения $p(t)$ при $t_0 = 0$:

$$C(t) = \lambda(t) \exp \left(- \int_0^t \lambda(\xi) d\xi \right). \quad (3.517)$$

Следовательно,

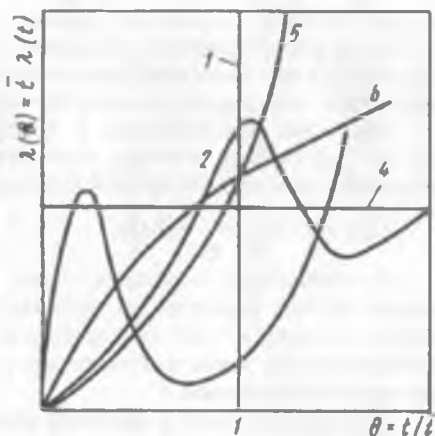
$$C(t) = p(t). \quad (3.518)$$

Поэтому любой непрерывный объект химической технологии, в котором происходит некоторый физико-химический процесс, можно рассматривать как пуассоновскую систему с точки зрения распределения частиц потока по времени пребывания в аппарате.

Величину $\lambda(t)$ можно рассматривать как меру вероятности выхода из аппарата частицы, которая находилась в нем в течение времени t .

Таким образом, λ -функция для аппарата идеального перемешивания

Рис. 3.39. Функция интенсивности для различной структуры потока: 1 — идеальное вытеснение; 2 — поток с застойными зонами; 3 — поток с байпасированием; 4 — идеальное смешивание; 5, 6 — потоки с промежуточной структурой



должна быть постоянной величиной, поскольку вероятность выхода частиц из такой системы одинакова для всех частиц.

При идеальном вытеснении все частицы потока покидают аппарат в момент времени $\bar{t} = V_a/u$, и поэтому функция интенсивности изображается графически в виде отрезка прямой, параллельной оси ординат в точке $\theta = 1$ (рис. 3.39).

Функции интенсивности для промежуточной структуры потока без ярко выраженной неравномерности структуры располагаются между двумя взаимно перпендикулярными прямыми, соответствующими λ -функциям идеального смешения и вытеснения. Возрастающий характер этих функций объясняется тем, что чем дольше часть жидкости остается в аппарате, тем больше вероятность ее выхода из него.

Когда главная (проточная) часть потока выходит из аппарата, то для системы с застойными зонами λ -функция возрастает. После выхода основной массы частиц из проточных зон вероятность покинуть систему для оставшихся частиц уменьшается, так как большинство их принадлежит застойным зонам. Таким образом, функция интенсивности не возрастает неограниченно, а, пройдя максимум, уменьшается (рис. 3.39). С течением времени частицы среды, попавшие в застойные зоны, постепенно начнут покидать систему. При этом чем дольше они будут оставаться в аппарате, тем больше вероятность их выхода из системы, т.е. λ -функция, пройдя через минимум, начнет неограниченно возрастать.

Характер функций интенсивности для потоков с байпасированием объясняется аналогично, при этом меняются лишь относительные объемы проточной (байпасной) и застойной (в данном случае основной) частей системы.

Внешний вид S - и I -функций не всегда дает однозначный ответ о наличии тех или иных неоднородностей в системе. Количественное определение параметров неоднородностей по этим функциям при неизвестном среднем времени пребывания потока также сопряжено со значительными труд-

ностями. Главное достоинство функций интенсивности заключается в том, что с их помощью сравнительно просто и наглядно устанавливается наличие в системе тех или иных неоднородностей потока, после чего возможно количественное определение соответствующих параметров.

Еще более чувствительна к неоднородностям структуры потока в аппарате κ -функция, которая определяется как линейная комбинация λ -функции и ее логарифмической производной:

$$\kappa(t) = \lambda(t) - \frac{d}{dt} \ln \lambda(t). \quad (3.519)$$

Из определения κ -функции видно, что она отражает не только интенсивность гибели (удаления из аппарата) частиц потока, но и скорость изменения логарифма этой интенсивности. Отсюда следует, что κ -функция интенсивности не менее чувствительна к гидродинамической обстановке в аппарате, чем λ -функция.

Другое толкование κ -функции можно получить, подставляя (3.516) в (3.519):

$$\kappa(t) = - \frac{1}{C(t)} \frac{dC(t)}{dt} = - \frac{d}{dt} \ln C(t), \quad (3.520)$$

т.е. κ -функция есть логарифмическая производная от функции плотности распределения элементов потока по времени пребывания в аппарате. Из сравнения (3.520) и (3.516) видно, что аналитические выражения κ -функций для важнейших типов структур потоков в аппаратах получаются проще, чем для λ -функций.

Основные уравнения взаимосвязи между безразмерными функциями $I(\theta)$, $F(\theta)$ и $C(\theta)$ имеют вид

$$F(\theta) + I(\theta) = 1, \quad (3.521)$$

$$F(\theta) = 1 - I(\theta) = \int_0^\theta C(\theta) d\theta, \quad (3.522)$$

$$C(\theta) = \frac{dF(\theta)}{d\theta} = - \frac{dI(\theta)}{d\theta}. \quad (3.523)$$

Отметим, что $\lambda(\theta) = \bar{I}(\theta)$; поэтому формула (3.516) для безразмерных переменных принимает вид

$$\lambda(\theta) = \frac{C(\theta)}{I(\theta)} = \frac{C(\theta)}{1 - F(\theta)} = - \frac{d}{d\theta} \ln I(\theta) = - \frac{d}{d\theta} \ln [1 - F(\theta)]. \quad (3.524)$$

В табл. 3.8 приведены выражения λ - и κ -функций для основных видов структуры потоков в аппарате, а на рис. 3.40, 3.41 изображены графики λ - и κ -функций в случае ячеечной модели для различного числа N ячеек.

λ-в κ-функции для основных видов структур потоков в аппарате

Модель	Уравнение модели	λ-функция	κ-функция
1. Идеальное перемешивание	$\frac{dC}{dt} = \frac{1}{\tau} (C_{вх} - C)$	$\lambda(\theta) = \frac{C(\theta)}{1 - F(\theta)} = \frac{\exp(-\theta)}{\exp(-\theta)} = 1$	$\kappa(\theta) = -\frac{1}{C(\theta)} \frac{dC(\theta)}{d\theta} = 1$
2. Идеальное вытеснение	$\frac{\partial C}{\partial t} = -u \frac{\partial C}{\partial x}$ ($0 \leq x \leq l$)	$\lambda(\theta) = \frac{\delta(\theta-1)}{1 - \pi(\theta-1)} = \delta(\theta-1)$ $\eta(t - \bar{t}) = \begin{cases} 0, & t < \bar{t} \\ 1, & t \geq \bar{t} \end{cases}$	$\kappa(\theta) = -\frac{d}{d\theta} [\delta(\theta-1)] / [\delta(\theta-1)]$
3. Ячеечная модель	$\bar{t} \frac{dC_i}{N dt} = C_{i-1} - C_i$ ($i = 1, 2, \dots, N$)	$\lambda(\theta, N) = \frac{N^{N-1} \theta^{N-1}}{(N-1)! \sum_{k=0}^{N-1} \frac{1}{k!} (N\theta)^k}$	$\kappa(\theta, N) = \frac{1 + N(\theta-1)}{\theta}$
4. Диффузионная модель	$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = D_l \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$ (аппарат бесконечной длины)	$\lambda(\theta) = \left\{ \frac{(Pe/\pi\theta)^{1/2} \exp[-Pe(1-\theta)^2] : 4\theta \right\} / \left\{ \operatorname{erfc} [N^{1/2} \theta - 1/2 \sqrt{\theta}] + \exp(Pe) \operatorname{erfc} [\sqrt{Pe}(1+\theta)/2\sqrt{\theta}] \right\}$	$\kappa(\theta) = \frac{1}{2\theta} - \frac{Pe(1-\theta^2)}{4\theta^2}$

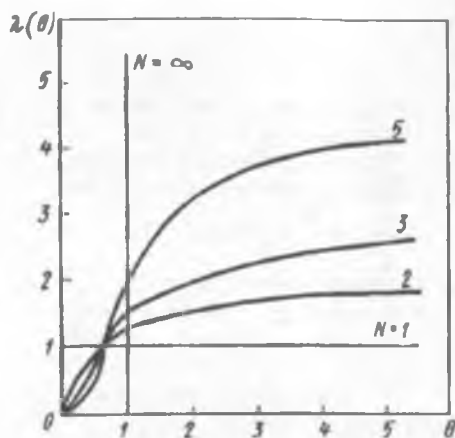


Рис. 3.40. λ -функции для ячеечной модели в зависимости от числа ячеек

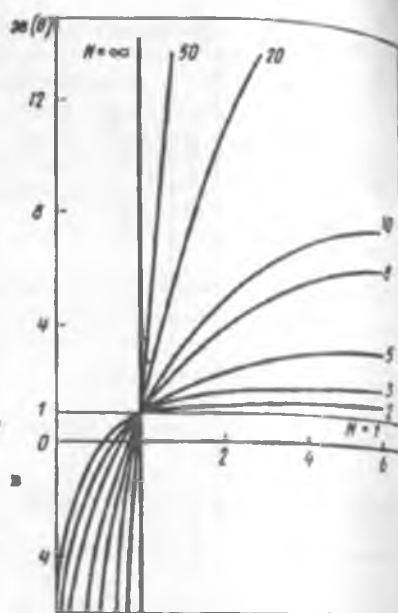


Рис. 3.41. κ -функции для ячеечной модели в зависимости от числа ячеек

Глава IV

МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИДРОМЕХАНИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Теоретическая гидродинамика рассматривает две группы гидромеханических процессов: процессы, составляющие внутреннюю задачу гидродинамики (например, движение потоков в трубах), и процессы, составляющие ее внешнюю задачу (например, движение частицы, осаждающейся в среде под действием силы тяжести). Процессы, связанные с движением потока через слой (фильтрация, псевдоожижение), составляют третью группу, относящуюся к смешанной задаче гидродинамики. В последнем случае можно рассматривать процесс фильтрации либо псевдоожижения с двух точек зрения: 1) как движение потока жидкости (газа) по каналам, образованным твердой фазой; 2) как обтекание частиц жидкостью или газом.

Исходя из такой классификации гидромеханических процессов можно выделить следующие виды задач, которые встречаются в данной области.

Внутренняя задача гидродинамики — изучение движения жидкостей и газов в трубопроводах и аппаратах.

Внешняя задача гидродинамики — изучение движения частиц в газообразной либо в жидкой среде. Сюда входят задачи расчета процессов гравитационного осаждения эмульсий, суспензий, газовзвесей, осаждения в поле центробежных и инерционных сил, гидравлическая классификация и пневмоклассификация, перемешивание твердых частиц с жидкостью и другие способы образования неоднородных систем.

Смешанная задача гидродинамики — изучение движения жидкостей и газов через пористый слой. В зависимости от высоты слоя H различают два случая: 1) $H = \text{const}$ — это процессы, связанные с движением газа в абсорберах, теплообменниках регенеративного типа, реакторах с неподвижным слоем катализатора, адсорберах, сушилках; 2) $H \neq \text{const}$, т.е. высота слоя увеличивается во время протекания процесса. Сюда относятся процессы фильтрования.

Из множества разнообразных гидромеханических процессов ниже остановимся на наиболее характерных из них, относящихся к внешней задаче гидродинамики.

§ 4.1. Описание движения частиц в газе и жидкости

Закон сопротивления при медленном движении частиц в жидкости. В общем случае движение частиц в жидкой либо газообразной среде может быть описано уравнением Навье—Стокса. При этом обычно вводят те или иные упрощения, заключающиеся в том, что из дифференциальных уравнений Навье—Стокса исключаются те слагаемые, которые малы по сравнению с остальными.

Одно из распространенных допущений заключается в том, что предполагается ползуный характер течения, т.е. для малых размеров частиц скорость их обтекания средней мала, соответствующее значение числа Рейнольдса мало ($Re_\nu < 1$) и вязкие силы в потоке преобладают над инерционными силами. В этом случае для несжимаемой жидкости уравнения движения в декартовых координатах примут вид

$$\begin{aligned}\frac{\partial P}{\partial x} &= \mu \left(\frac{\partial^2 w_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w_x}{\partial z^2} \right), \\ \frac{\partial P}{\partial y} &= \mu \left(\frac{\partial^2 w_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w_y}{\partial z^2} \right), \\ \frac{\partial P}{\partial z} &= \mu \left(\frac{\partial^2 w_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w_z}{\partial z^2} \right).\end{aligned}\tag{4.1}$$

Уравнения движения (4.1) необходимо дополнить уравнением неразрывности

$$\frac{\partial w_x}{\partial x} + \frac{\partial w_y}{\partial y} + \frac{\partial w_z}{\partial z} = 0.\tag{4.2}$$

Рассмотрим движение сферической частицы радиусом R в медленном потоке несжимаемой жидкости (рис. 4.1). Тангенциальная и нормальная составляющие скорости должны обращаться в нуль на поверхности частицы ($W_r = W_\theta = 0$).

Для сферической системы координат профиль скоростей можно описать уравнениями

$$W_r = W_0 \left[1 - \frac{3}{2} \frac{R}{r} + \frac{1}{2} \left(\frac{R}{r} \right)^3 \right] \cos \theta, \quad (4.3)$$

$$W_\theta = W_0 \left[1 - \frac{3}{4} \frac{R}{r} - \frac{1}{4} \left(\frac{R}{r} \right)^3 \right] \sin \theta, \quad (4.4)$$

где W_0 — скорость потока на бесконечном удалении от частицы.

Можно показать, что на большом расстоянии от обтекаемой частицы составляющая скорости W_z приближается к значению W_0 . Из уравнений (4.1), (4.2) может быть аналитически найдено распределение давлений:

$$P = P_0 - \rho g z - \frac{3}{2} \frac{\mu W_0}{R} \left(\frac{R}{r} \right)^2 \cos \theta, \quad (4.5)$$

где P_0 — давление в плоскости $z = 0$ на большом расстоянии от частицы; $\rho g z$ — гидростатический эффект; ρ — плотность жидкости.

Уравнения (4.3) — (4.5) справедливы только для ползущего течения ($\frac{W_0 d \rho}{\mu} < 0,1$), которое характеризуется отсутствием завихрений за кормовой частью частицы.

В каждой точке поверхности частицы сила давления жидкости перпендикулярна поверхности, причем на оси z составляющая давления равна $P \cos \theta$.

Если просуммировать локальные давления, действующие на всей поверхности сферической частицы, то после интегрирования получим результирующую силу F_1 , действующую в направлении оси z :

$$F_1 = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi (-P_{r=R} \cos \theta) R^2 \sin \theta \, d\theta \, d\varphi. \quad (4.6)$$

В соответствии с уравнением (4.5) распределение давления по поверхности частицы (при $r = R$) описывается зависимостью

$$P|_{r=R} = P_0 - \rho g R \cos \theta - \frac{3}{2} \frac{\mu W_0}{R} \cos \theta. \quad (4.7)$$

Подставим выражение (4.7) в интеграл (4.6):

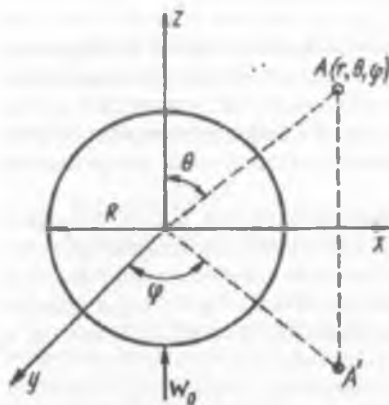


Рис. 4.1. К оценке скорости обтекания сферической частицы

$$F_1 = -\frac{4}{3} \pi R^3 \rho g + 2\pi \mu R W_0. \quad (4.8)$$

Первый член в правой части уравнения (4.8) характеризует силу выталкивания, а второй — силу сопротивления вследствие сил давления.

Кроме нормально направленной к поверхности частицы силы F_1 на нее действует касательная сила F_2 (в направлении θ). В каждой точке поверхности возникает касательное напряжение τ , отнесенное к единичной поверхности в направлении θ . В направлении оси z сила F_2 равна $\tau(\sin\theta)$. На всю поверхность частицы действует результирующая сила

$$F_2 = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi (\tau_r = R \sin\theta) R^2 \sin\theta d\theta d\varphi. \quad (4.9)$$

Распределение напряжений по поверхности сферической частицы характеризуется уравнением

$$\tau = \frac{3}{2} \cdot \frac{\mu W_0}{R} \left(\frac{R}{r}\right)^4 \sin\theta, \quad (4.10)$$

из которого при $r = R$ находим

$$\tau|_{r=R} = \frac{3}{2} \frac{\mu W_0}{R} \sin\theta. \quad (4.11)$$

После подстановки выражения (4.11) в интеграл (4.9) получаем силу вязкого сопротивления

$$F_2 = 4\pi \mu R W_0. \quad (4.12)$$

Общая сила F , действующая со стороны потока медленно движущейся жидкости на сферическую частицу, определяется суммированием сил F_1 и F_2 , т.е.

$$F = -\frac{4}{3} \pi R^3 \rho g + 6\pi \mu R W_0. \quad (4.13)$$

Первый член в правой части уравнения (4.13) соответствует силе выталкивания, а второй член представляет собой полную силу сопротивления. Таким образом, величина $6\pi \mu R W_0$ является кинетической составляющей силы F :

$$F_k = 6\pi \mu R W_0. \quad (4.14)$$

Уравнение (4.14) выражает закон Стокса. Полная сила сопротивления при обтекании сферической частицы пропорциональна количеству движения и площади лобового сечения f :

$$F_k = \xi \frac{\rho W_0^2}{2} f. \quad (4.15)$$

Отсюда находим коэффициент пропорциональности

$$\xi = \frac{2F_k}{\rho W_0^2 f}. \quad (4.16)$$

Подставив значения $f = \pi R^2$ и F_k из уравнения (4.14) в последнее уравнение, получим

$$\xi = \frac{12\mu}{\rho W_0 R} = \frac{24}{Re}. \quad (4.17)$$

Следовательно, коэффициент пропорциональности ξ является функцией числа Рейнольдса и представляет собой коэффициент сопротивления.

Отметим, что полученный закон сопротивления справедлив при ламинарном режиме движения ($Re < 1$).

Течение в пограничном слое. Рассмотрим второй предельный случай движения потока газа или жидкости при обтекании твердых тел, когда силы вязкости пренебрежимо малы, что справедливо при больших значениях чисел Рейнольдса. В этом случае уравнения Навье—Стокса упрощаются, поскольку на некотором расстоянии от обтекаемого тела вследствие малой вязкости в потоке преобладают силы инерции, причем жидкость не скользит по поверхности тела, а как бы прилипает к ней. Переход от скорости, равной нулю, к скорости W_0 на некотором расстоянии от обтекаемой поверхности происходит постепенно в пограничном слое. В этом слое градиент скорости dW/du в направлении, перпендикулярном обтекаемой поверхности, очень велик, а поперечная составляющая скорости W_y мала по сравнению с W_x . Соответственно уравнения Навье—Стокса для двумерного стационарного ламинарного пограничного слоя несжимаемой жидкости имеют вид

$$W_x \frac{\partial W_x}{\partial x} + W_y \frac{\partial W_x}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + \nu \left(\frac{\partial^2 W_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 W_x}{\partial y^2} \right), \quad (4.18)$$

$$W_x \frac{\partial W_y}{\partial x} + W_y \frac{\partial W_y}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y} + \nu \left(\frac{\partial^2 W_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 W_y}{\partial y^2} \right). \quad (4.19)$$

Члены $W_x \frac{\partial W_x}{\partial x}$ и $W_y \frac{\partial W_y}{\partial y}$ имеют одинаковый порядок и сравнимы с $\nu \frac{\partial^2 W_x}{\partial y^2}$, тогда как величина $\nu \frac{\partial^2 W_x}{\partial x^2}$ пренебрежимо мала по сравнению с другими членами уравнения (4.18). Аналогично, в уравнении (4.19) все члены, содержащие W_y и ее производные, малы. Таким образом, член $(1/\rho) (\partial P/\partial y)$ также незначителен и можно сказать, что давление мало изменяется в пределах от поверхности обтекаемого тела до границы пограничного слоя.

Течение за пограничным слоем можно считать безвихревым, так как влияние сил вязкости в этой области не проявляется. В этом случае распределение давления описывается уравнениями Эйлера (т.е. уравнениями идеальной жидкости), так что производную $\partial P/\partial x$ в пограничном слое можно считать заданной и не зависящей от y .

Совместное решение уравнения движения

$$W_x \frac{\partial W_x}{\partial x} + W_y \frac{\partial W_x}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \nu \frac{\partial^2 W_x}{\partial y^2} \quad (4.20)$$

и уравнения неразрывности

$$\frac{\partial W_x}{\partial x} + \frac{\partial W_y}{\partial y} = 0 \quad (4.21)$$

с граничными условиями

$$\begin{aligned} W_x = W_y = 0 \quad \text{при} \quad y = 0, \\ W_x = W_0 \quad \text{при} \quad y = \delta \end{aligned} \quad (4.22)$$

дает распределение скоростей в пограничном слое.

Таким образом, при изучении движения вязких жидкостей следует учитывать существование двух областей: 1) течение вне пограничного слоя, характеризуемое закономерностями для идеальных жидкостей; 2) течение в пограничном слое, где следует учитывать силы трения, которые вызывают торможение слоев жидкости вблизи обтекаемой поверхности.

Пограничный слой при обтекании тонкой плоской пластины тем тоньше, чем меньше силы вязкости. Его толщину $\delta(x)$ можно оценить, рассмотрев силы трения и вязкости. Если выделить в жидкости элементарный объем $dx dy dz$, то сила инерции, действующая вдоль оси x , будет равна $\rho \frac{dW_x}{dt} dx dy dz$. При установившемся движении

$$\frac{dW_x}{dt} = \frac{\partial W_x}{\partial x} \frac{dx}{dt} = W_x \frac{\partial W_x}{\partial x}, \quad (4.23)$$

откуда сила инерции равна $\rho \frac{dW_x}{dx} W_x dx dy dz$.

Просуммируем силы трения, параллельные направлению движения потока:

$$\left(\tau + \frac{\partial \tau}{\partial y} dy \right) dx dz - \tau dx dz = \frac{\partial \tau}{\partial y} dx dy dz. \quad (4.24)$$

Приравняем суммарную силу трения и силу инерции:

$$\frac{\partial \tau}{\partial y} dx dy dz = \rho W_x \frac{\partial W_x}{\partial x} dx dy dz. \quad (4.25)$$

Отсюда

$$\frac{\partial \tau}{\partial y} = \rho W_x \frac{\partial W_x}{\partial x}. \quad (4.26)$$

Выразим силу трения с помощью закона Ньютона.

$$\mu \frac{\partial^2 W_x}{\partial y^2} = \rho W_x \frac{\partial W_x}{\partial x}. \quad (4.27)$$

В рассматриваемом случае величина $\frac{\partial W_x}{\partial x}$ пропорциональна W_0/l (где l — длина пластины, а W_0 — скорость потока вне пограничного слоя). Градиент скорости в направлении оси y можно выразить через толщину пограничного слоя в виде W_0/δ . Значит, сила трения пропорциональна величине $\mu W_0/\delta^2$. Тогда

$$\frac{\mu W_0}{\delta^2} \approx \rho \frac{W_0^2}{l} \quad (4.28)$$

Следовательно, толщина пограничного слоя составляет

$$\delta \approx \sqrt{\frac{\mu l}{\rho W_0}} \quad (4.29)$$

откуда, вводя число Рейнольдса, получаем

$$\frac{\delta}{l} = \frac{1}{\sqrt{Re_l}} \quad (4.30)$$

т.е. безразмерная толщина пограничного слоя δ/l обратно пропорциональна корню квадратному из числа Рейнольдса.

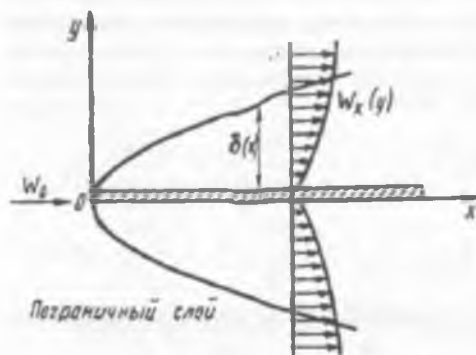


Рис. 4.2. Схема пограничного слоя при обтекании плоской пластины

Уравнения (4.20) и (4.21) называются уравнениями *Прандтля* для пограничного слоя. Они справедливы для плоской стенки, но могут быть использованы и для криволинейных поверхностей при условии, что радиус кривизны не изменяется очень резко.

Уравнение (4.20) в случае обтекания абсолютно гладкой неподвижной тонкой пластины при установившемся пограничном слое упрощается, так как $dP/dx = 0$ (при установившемся движении давление P в течениях потока постоянно). На пластине при $y = 0$ и $x > 0$ име-

ем $W_x = W_y = 0$ (условие прилипания), а на внешней границе пограничного слоя при $y = \infty$ скорость равна $W_x = W_0$ (рис. 4.2).

В данном случае уравнения движения и неразрывности решаются относительно скоростей W_x и W_y для ламинарного режима (решение Блазиуса). Решение задачи Блазиуса дает возможность вычислить также касательную составляющую напряжения вязкого трения на поверхности пластины τ :

$$\tau = 0,332 \sqrt{\rho \mu W_0 / x} \quad (4.31)$$

Поэтому общее сопротивление $F_{\text{общ}}$ одной стороны прямоугольной пластины шириной b и длиной l есть

$$F_{\text{общ}} = b \int_0^l \tau dx = 0,664 b \sqrt{\mu l \rho W_0^3}. \quad (4.32)$$

коэффициент сопротивления ξ составляет

$$\xi = \frac{2F_{\text{общ}}}{\rho W_0^2 b l} = \frac{1,328}{\sqrt{Re_l}}, \quad (4.33)$$

где $Re_l = \frac{W_0 l \rho}{\mu}$.

Отметим, что полученное решение задачи (4.33) справедливо только для ламинарного режима течения, т.е. $Re_l < 5 \cdot 10^5 \div 10^6$. При увеличении скорости потока жидкость, заторможенная в пограничном слое, может отрываться от стенки. Точка отрыва пограничного слоя определяется как точка, в которой трение на стенке равно нулю: $\tau_{\text{ст}} = \mu \frac{\partial w}{\partial y} \Big|_{y=0} = 0$ или

$$\frac{\partial w}{\partial y} \Big|_{y=0} = 0.$$

С развитием турбулентности и в условиях отрыва пограничного слоя от поверхности обтекаемой частицы вблизи от этой поверхности давление, оказываемое потоком, понижается, что приводит к вихреобразованию в зоне пониженного давления. Следует отметить также, что разность давлений жидкости на лобовую поверхность частицы, встречающей обтекающий поток, и на ее кормовую поверхность превышает разность ΔP , возникающую при ламинарном обтекании. Следовательно, сопротивление в области турбулентного движения ($Re_l > 10^6$) значительно превышает значения, определяемые уравнением (4.33). Сопротивление давления зависит от места отрыва потока жидкости от поверхности обтекаемой частицы, что, в свою очередь, связано с формой и шероховатостью частиц, скоростью потока и другими физическими свойствами системы. В связи с тем что теория обтекания частиц при больших числах Рейнольдса не разработана, гидравлическое сопротивление определяется экспериментально.

Общий закон сопротивления среды. При количественном определении гидравлических сопротивлений частиц, движущихся в потоке жидкости или газа, необходимо установить связь между потерей кинетической энергии и режимом движения. Такая связь обычно представляется в форме соотношений между безразмерными числами, характеризующими движение частиц. Так, сопротивление среды при движении шарообразной частицы определяется соотношениями

$$\xi = \frac{24}{Re}, \quad Re < 0,1. \quad (4.34)$$

$$\xi = \frac{18,5}{Re^{0,6}}, \quad 2 < Re < 500. \quad (4.35)$$

$$\xi \approx 0,44, \quad 500 < Re < 2 \cdot 10^5, \quad (4.36)$$

где ξ — общий коэффициент сопротивления среды.

Рассмотренный закон сопротивления среды относится к свободному движению шарообразных твердых частиц. Для реальных частиц вводится фактор формы ψ (коэффициент сферичности), который определяется как отношение поверхности шара $f_{ш}$, имеющего такой же объем, как и реальная частица, к поверхности частицы f :

$$\psi = f_{ш}/f = 4,878 V^{2/3}/f. \quad (4.37)$$

Поверхность шара с объемом, равным объему частицы, определяется по эквивалентному диаметру d_3 , равному

$$d_3 = \sqrt[3]{6V_{ч}/\pi}. \quad (4.38)$$

Отсюда

$$f_{ш} = \pi (6V_{ч}/\pi)^{2/3}. \quad (4.39)$$

Таким образом, для твердых частиц различной формы

$$\xi = f(Re, \psi) = A(\psi)/Re. \quad (4.40)$$

Числовые значения фактора формы ψ для различных геометрических тел приводятся в литературе.

Для турбулентного обтекания коэффициент сопротивления не зависит от числа Re , а только от фактора формы ψ :

$$\xi = 5,31 - 4,88\psi. \quad (4.41)$$

Свободное осаждение частиц. Рассмотрим частицу массой m , движущуюся в неподвижной среде под действием внешней силы $F_{в}$. Внешней силой может быть сила тяжести или сила центробежного поля.

Частица, падающая под действием силы тяжести, будет увеличивать свою скорость до тех пор, пока сила сопротивления среды не уравновесит силу тяжести. Затем частица продолжит движение с постоянной скоростью. Эту постоянную скорость называют *скоростью свободного осаждения* $W_{ос}$. Таким образом, при падении частицы имеют место две стадии ее движения: 1) движение с увеличением скорости; 2) движение с постоянной скоростью. Отметим, что возрастание скорости от $W = 0$ до $W = W_{ос}$ происходит в течение очень короткого промежутка времени, поэтому в большинстве случаев представляет интерес лишь вторая стадия движения частиц.

Для движущейся частицы массой m сумма действующих сил равна $m(dW/dt)$, т.е.

$$F_{в} - F_c - F_A = m \frac{dW}{dt}, \quad (4.42)$$

где F_c — сила сопротивления среды; F_A — подъемная (архимедова) сила.

Внешняя сила $F_{в}$ (сила тяжести, центробежная сила) согласно закону Ньютона может быть выражена равенством:

$$F_B = ma, \quad (4.43)$$

сила сопротивления среды F_C — равенством

$$F_C = \xi \frac{\rho W^2 f}{2}. \quad (4.44)$$

В уравнениях (4.43), (4.44) a — ускорение движения частицы под действием внешней силы F_B ; W — скорость частицы относительно среды; ρ — плотность среды; f — площадь поперечного сечения частицы; ξ — коэффициент сопротивления.

Подъемная (архимедова) сила, пропорциональная массе среды, вытесненной частицей, есть

$$F_A = \left(\frac{m}{\rho_{TB}} \right) \rho a, \quad (4.45)$$

где ρ_{TB} — плотность материала частицы.

Из уравнений (4.42) — (4.45) получаем

$$\frac{dW}{dt} = a - \frac{\rho a}{\rho_{TB}} - \frac{\xi \rho W^2}{2m} f. \quad (4.46)$$

Уравнение (4.46) характеризует взаимодействие сил, в поле которых находится частица. Для его решения необходимо знать природу внешней силы и закон сопротивления.

Рассмотрим случай осаждения под действием силы тяжести ($a = g$). В этом случае уравнение (4.46) примет вид

$$\frac{dW}{dt} = g \left(1 - \frac{\rho}{\rho_{TB}} \right) - \frac{\xi \rho W^2}{2m} f. \quad (4.47)$$

Будем рассматривать осаждение сферических частиц диаметром d_c на участке с постоянной скоростью ($dW/dt = 0$). Тогда из уравнения (4.47) получаем

$$W^2 = \frac{4}{3} \frac{(\rho_{TB} - \rho) d_c g}{\xi \rho} \quad (4.48)$$

или

$$W = \sqrt{\frac{4}{3} \frac{(\rho_{TB} - \rho) d_c g}{\xi \rho}}. \quad (4.49)$$

Уравнение (4.49) справедливо для ламинарного, переходного и турбулентного режимов осаждения частиц с различной сферичностью, причем коэффициент сопротивления ξ определяется уравнением (4.40).

Для ламинарного режима осаждения ($Re_c < 0,1$) сила сопротивления F_C , действующая на частицу, определяется по Стоксу уравнением

$$F_C = 3\pi\eta d_c W. \quad (4.50)$$

Тогда, подставляя выражение (4.50) в уравнение (4.47) и учитывая, что для участка установившегося осаждения частицы $dW/dt = 0$, получаем известную формулу Стокса для скорости осаждения сферической частицы:

$$W = \frac{(\rho_{ТВ} - \rho) \xi d^2}{18\mu} \quad (4.51)$$

Если частица осаждается в центробежном поле, то $a = r\omega^2$, где ω — угловая скорость, а r — радиус траектории частицы. Подставляя это выражение a в уравнение (4.46), получим

$$\frac{dW}{dt} = r\omega^2 \left(1 - \frac{\rho}{\rho_{ТВ}}\right) - \frac{\xi \rho W^2}{2m} f. \quad (4.52)$$

Для участка установившегося движения частицы ($dW/dt = 0$) уравнение (4.52) запишется в виде

$$W = \sqrt{\frac{2mr\omega^2(\rho_{ТВ} - \rho)}{\rho_{ТВ} \xi \rho f}} \quad (4.53)$$

Применение формул (4.49), (4.51), (4.53) требует предварительного определения режима осаждения и числа Re , выражение для которого содержат также W . В связи с этим уравнения (4.49), (4.51), (4.53) применимы для расчета скорости осаждения W методом последовательных приближений, т.е. задают режим осаждения, рассчитывают скорость и вновь проверяют, находится ли рассчитанное значение скорости в заданном гидродинамическом режиме.

Данной процедуры расчета скорости осаждения можно избежать, преобразовав уравнение (4.49) методом Лященко. Этот метод основан на постановке в уравнение (4.49) выражения

$$W = \frac{Re\mu}{d\sqrt{\rho}} \quad (4.54)$$

и возведением в квадрат обеих частей полученного уравнения. В результате приходим к уравнению

$$\xi Re^2 = \frac{4}{3} \frac{d^2 \rho^2 g}{\mu^2} \frac{\rho_{ТВ} - \rho}{\rho} \quad (4.55)$$

Выражение в правой части уравнения (4.55) представляет собой безразмерное число Архимеда. Тогда

$$\xi Re^2 = \frac{4}{3} Ar. \quad (4.56)$$

Поскольку коэффициент сопротивления ξ зависит от режима осаждения, можно установить граничные значения числа Архимеда, соответствующие переходу из одной области осаждения в другую.

В области ламинарного режима осаждения ($Re < 2$) имеем $\xi = \frac{24}{Re}$ и уравнение (4.56) примет вид

$$Re = \frac{Ar}{18} \quad (4.57)$$

Критическое значение числа Архимеда, соответствующее верхнему пределу числа Re , есть $Ar = 36$. Следовательно, существование ламинарного режима осаждения ограничивается условием $Ar < 36$.

В автомодельной области $\xi = 0,44$ и уравнение (4.56) запишется так:

$$Re = 1,74 Ar^{0,5}. \quad (4.58)$$

В переходной области верхнее предельное значение числа Архимеда соответствует значению $Re = 500$. Коэффициент сопротивления равен $\xi = 1,85/Re^{0,6}$ и уравнение (4.56) примет вид

$$Re = 0,152 Ar^{0,715}. \quad (4.59)$$

Поэтому число Архимеда в промежуточной области изменяется в пределах $36 < Ar < 8,3 \cdot 10^4$.

Общая полуэмпирическая зависимость, связывающая безразмерные числа Ar и Re , имеет вид

$$Re = \frac{Ar}{18 + 0,61 \sqrt{Ar}}. \quad (4.60)$$

Таким образом, расчет скорости осаждения методом Ляшенко сводится к следующему: 1) определяют значение числа Архимеда и по нему режим осаждения; 2) рассчитывают скорость осаждения.

Явление стесненности при осаждении группы частиц. Движение частиц дисперсной фазы в сплошной среде может приближенно рассматриваться как независимое, что приводит к возможности применения уравнений, описывающих движение одиночных частиц к движению групп частиц. Однако движение двухфазных систем с концентрацией дисперсной фазы более 2—5 объемных процентов характеризуется возникновением явления стесненности, проявляющегося вследствие вязких взаимодействий частиц друг с другом.

Распространение уравнений движения одиночных частиц на движение групп частиц требует введения дополнительных граничных условий на поверхности каждой из присутствующих частиц. Единственное точное решение подобного рода задачи о многих частицах было получено для случая медленного движения двух сфер параллельно их линии центров. Для большего числа частиц такое решение не найдено. В этом случае используют схему последовательных приближений, с помощью которой краевую задачу можно решить с любой точностью, рассматривая каждый раз граничные условия только для одной из частиц. Данная схема положена в основу метода отражений, позволяющего учитывать возмущения, создаваемые частицами первого, второго и т.д. порядков.

Использование указанного метода для определения скорости осаждения упорядоченных и хаотических суспензий в виде функции от объемной концентрации дисперсной фазы при допущении одинаковых скоростей осаждения частиц приводит к следующим выражениям, связывающим скорость осаждения W со стоксовой скоростью осаждения одиночной частицы W_0 :

если частицы образуют кубическую решетку, то

$$\frac{W}{W_0} = \frac{1}{1 + 1,91 \phi^{1/3}}, \quad (4.61)$$

где φ — объемная доля частиц;

если частицы образуют ромбоэдрическую решетку, то

$$\frac{W}{W_0} = \frac{1}{1 + 1.79\varphi^{1/3}}, \quad (4.62)$$

если частицы расположены хаотически, то

$$\frac{W}{W_0} = \frac{1}{1 + 1.3\varphi^{1/3}}. \quad (4.63)$$

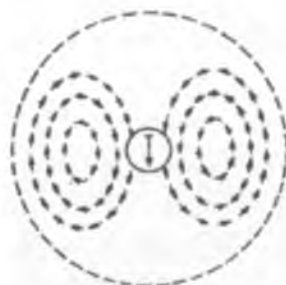


Рис. 4.3. Осаждение твердой сферы, находящейся в центре окружающей ее жидкой оболочки

Применение метода отражений ограничивается разбавленными системами. Для промежуточных и концентрированных систем полезной оказывается ячеечная модель двухфазной системы. Эта модель основана на допущении, что облако частиц может быть представлено как набор одинаковых ячеек, в каждой из которых находится одна сфера. Тем самым первая задача сводится к рассмотрению одиночной частицы и окружающей ее жидкой оболочки.

На рис. 4.3 схематически изображена сферическая ячеечная модель со "свободной поверхностью". Радиус жидкой оболочки определяется из условия, что внутри ячейки объемная концентрация дисперсной фазы должна

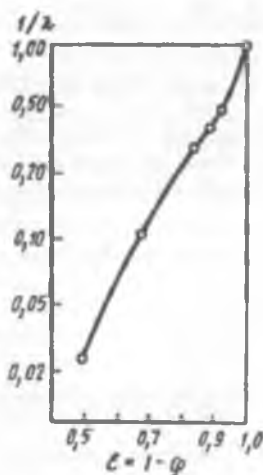
на быть такой же, как и во всей системе. Возмущение, вносимое в поток каждой частицей, локализовано в пределах объема жидкости, непосредственно связанной с частицей. На внешней поверхности ячейки (пунктирная линия) отсутствует трение, поэтому ничто не мешает жидкости протекать по этой поверхности. На рис. 4.3 показана мгновенная картина линий тока жидкости внутри ячейки. Скорость жидкости на поверхности ячейки такова, что при сближении двух ячеек, принадлежащих разным частицам, скорости жидкости в точке соприкосновения оказываются одинаковыми для обеих сфер как по величине, так и по направлению.

Применение ячеечной модели к седиментации облака частиц дает следующее соотношение между скоростью осаждения W и скоростью осаждения одиночной частицы W_0 в неограниченном объеме жидкости:

$$\frac{W}{W_0} = \frac{3 - \frac{9}{2}\varphi^{1/3} + \frac{9}{2}\varphi^{5/3} - 3\varphi^2}{3 + 2\varphi^{5/3}}. \quad (4.64)$$

Одна из распространенных теорий, связывающая порозность и скорость осаждения в двухфазной системе, в одинаковой степени применима как к разбавленным, так и к концентрированным системам, заключается в предположении, что сферическая частица погружена в пористую среду. Далее на основе обобщения эмпирического закона фильтрации Дарси и

Рис. 4.4. Зависимость коэф-
фициента λ от объемной доли
дисперсной фазы φ :
о — экспериментальные
данные; — рассчитанные значения



ходят выражение для силы сопротивления, испытываемой частицей в
области монодисперсных частиц:

$$F_c = 3\pi\mu d_p W_0 \lambda. \quad (4.65)$$

Коэффициент λ , отражающий взаимные влияния частиц, зависит от
общей объемной концентрации частиц φ и определяется выражением

$$\lambda = \frac{4 + 3\varphi + 3(8\varphi - 3\varphi^2)^{1/2}}{(2 - 3\varphi)^2}. \quad (4.66)$$

На рис. 4.4 приведено сравнение экспериментальных значений коэф-
фициента λ со значениями, рассчитанными по формуле (4.66).

Во всем диапазоне концентраций φ наблюдается удовлетворительное
соответствие.

Применение формулы (4.66) ограничивается монодисперсными сис-
темами. В литературе имеется распространение ее на полидисперсные сис-
темы. Считая, что нарушение, создаваемое сферической частицей в потоке
при низких числах Рейнольдса, аппроксимируется точечной силой, локали-
зованной в центре сферы, и решая систему уравнений, определяющую вяз-
кие взаимодействия между частицами, получаем следующее выражение
для силы сопротивления, испытываемой частицей при заданном распре-
делении частиц по размерам:

$$F_c = 3\pi\mu d_p \left(1 + a \frac{d_p}{2} + \frac{1}{12} a^2 d_p^2\right), \quad (4.67)$$

$$\alpha = \frac{\{6\pi M_2 + [36\pi^2 M_2^2 + 24\pi M_1(1-3\varphi/2)]^{1/2}\}}{2-3\varphi} \quad (4.68)$$

Здесь M_1 , M_2 и M_3 — три первых момента функции распределения частиц по размерам $n(R_q)$ (R_q — радиус частицы), а общее выражение для n -го момента имеет вид

$$M_n = \int n(R_q) R_q^n dR_q. \quad (4.69)$$

Следует отметить, что выражения (4.66) и (4.67) для учета стесненности справедливы для потоков при низких числах Рейнольдса. Кроме того, выражение (4.67) дает удовлетворительную точность для объемных долей дисперсной фазы $\varphi < 10\%$.

§ 4.2. Модель периодического осаждения суспензий

Процесс осаждения монодисперсной первоначально однородной суспензии под действием силы тяжести можно описать системой уравнений, включающей уравнения сохранения массы и уравнения движения каждой из фаз:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho W)}{\partial z} = 0, \quad (4.70)$$

$$\frac{\partial \rho_{TB}}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_{TB} W_{TB})}{\partial z} = 0. \quad (4.71)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{TB} \partial W_{TB}}{\partial t} + \frac{\partial \rho_{TB} W_{TB}}{\partial z} \frac{\partial W_{TB}}{\partial z} = -\rho_{TB} \left(1 - \frac{\bar{\rho}}{\rho_{TB}}\right) g + \\ + \rho_{TB} F (W - W_{TB}) - \frac{\rho_{TB}}{\bar{\rho}} \frac{\partial P}{\partial z}, \end{aligned} \quad (4.72)$$

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial \rho W}{\partial z} + \frac{\partial \rho_{TB} \partial W_{TB}}{\partial t} + \frac{\partial \rho_{TB} W_{TB} \partial W_{TB}}{\partial z} = \\ = -\frac{\partial P}{\partial z} - (\rho_{TB} + \rho) g. \end{aligned} \quad (4.73)$$

Здесь W — скорость сплошной фазы; W_{TB} — скорость движения твердых частиц; z — координата оси, направленной противоположно действию силы тяжести; P — давление; t — время; F — постоянная времени процесса обмена количеством движения между частицами и средой.

Постоянная F определяется по формуле Эргуна

$$F = \frac{75}{2} \left(\frac{1-\epsilon}{\epsilon^3}\right) \frac{14}{\bar{\rho}_{TB} d_{TB}^{2.75}} + \frac{1.75}{2\epsilon} \left(\frac{\bar{\rho}}{\rho_{TB}}\right) \frac{W_e}{d_q}, \quad (4.74)$$

где ϵ — порозность (доля объема, занятая жидкостью); d_q — диаметр частиц; μ — вязкость среды; $\rho = \bar{\rho}\epsilon$ — плотность среды; $\bar{\rho}$ — плотность чистой жидкости; $\rho_{TB} = \bar{\rho}_{TB}(1 - \epsilon)$ — плотность твердой фазы; $\bar{\rho}_{TB}$ — плотность чистой твердой фазы.

Формула (4.74) представляет собой обобщенное выражение уравнения Стокса. Величина F имеет размерность, обратную времени. Ее физический смысл — обратное время релаксации процесса осаждения. Для приближенных расчетов иногда принимают

$$F \approx \frac{75}{2} \left(\frac{1-\epsilon}{\epsilon^2} \right) \frac{\mu}{\rho_{TB} d_q^2}. \quad (4.75)$$

В уравнениях (4.72), (4.73) силы вязкости не учитываются. Уравнения (4.70), (4.71) характеризуют вытеснение жидкости при осаждении некоторого объема частиц в направлении z . Уравнение (4.72) описывает действие подъемной силы, силы сопротивления среды и давления на движение твердых частиц. Уравнение (4.73) представляет общее количество движения в системе.

Исключая из уравнений (4.72), (4.73) градиент давления $\partial P/\partial z$ и учитывая вытеснение жидкости вверх при осаждении частиц со скоростью

$$W_{TB} = - \frac{W\epsilon}{1-\epsilon}, \quad (4.76)$$

получим зависимость скорости стесненного осаждения W_{TB} и порозности ϵ от времени и вертикальной координаты z :

$$\begin{aligned} & \left[1 + \frac{\bar{\rho}}{\rho_{TB}} \left(\frac{1-\epsilon}{\epsilon} \right) \right] \frac{\partial W_{TB}}{\partial t} + \left[1 + \frac{\bar{\rho}}{\rho_{TB}} \left(\frac{1-\epsilon}{\epsilon} \right)^2 \right] W_{TB} \frac{\partial W_{TB}}{\partial z} - \\ & - \frac{\bar{\rho} W_{TB}}{\rho_{TB} \epsilon^2} \left[\frac{\partial \epsilon}{\partial t} - \left(\frac{1-\epsilon}{\epsilon} \right) W_{TB} \frac{\partial \epsilon}{\partial z} \right] = \left[\frac{\bar{\rho}}{\rho_{TB} \epsilon} - \left(1 - \frac{\bar{\rho}}{\rho_{TB}} \right) \right] g - \\ & - \frac{F}{\epsilon^2} W_{TB}. \end{aligned} \quad (4.77)$$

Уравнение (4.71) может быть представлено в виде

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \frac{W_{TB} \partial \epsilon}{\partial z} = (1 - \epsilon) \frac{\partial W_{TB}}{\partial z}. \quad (4.78)$$

Тогда соотношения (4.77), (4.78) для заданных начальных и граничных условий, имеющих вид

$$\epsilon(0, z) = \epsilon_n, \quad W_{TB}(0, z) = W_n \quad \text{при } t = 0, \quad (4.79)$$

$$\epsilon(z, 0) = \epsilon_{TP}, \quad W_{TB}(z, 0) = 0 \quad \text{при } z = 0, \quad (4.80)$$

представляют собой два уравнения относительно двух неизвестных функций $\epsilon = \epsilon(t, z)$ и $W_{TB} = W_{TB}(t, z)$.

§ 4.3. Модель непрерывного осаждения

Непрерывное осаждение суспензий, широко используемое в промышленности, может проводиться под действием двух видов сил: сил тяжести и центробежных сил. Первый способ осаждения находит применение для разделения грубо дисперсных суспензий, а второй — мелко дисперсных. Рассмотрим каждый из этих процессов.

Непрерывное разделение суспензий под действием сил тяжести. В настоящее время используют более десятка различных моделей непрерывного осаждения суспензий, базирующихся в большинстве случаев на опытных данных и не имеющих четких границ применения.

Одна из наиболее простых моделей основывается на допущении о постоянстве скорости осаждения по высоте отстойника и о монодисперсности частиц твердой фазы. Пусть количество поступающей на разделение суспензии составляет $G_{см}$, а содержание твердой фазы есть $X_{см}$; количество осветленной жидкости, покидающей отстойник, составляет $G_{осв}$, а содержание твердой фазы есть $X_{осв}$. Соответственно для осадка имеем $G_{ос}$ и $X_{ос}$.

Для непрерывного стационарного процесса осаждения должны выполняться условия общего материального баланса:

$$G_{см} = G_{ос} + G_{осв} \quad (4.81)$$

и материального баланса по твердой фазе:

$$G_{см} X_{см} = G_{ос} X_{ос} + G_{осв} X_{осв}. \quad (4.82)$$

Выразив из уравнения (4.81) величину $G_{ос}$ и подставив в уравнение (4.82), получим

$$G_{осв} = G_{см} \frac{X_{см} - X_{ос}}{X_{осв} - X_{ос}}. \quad (4.83)$$

Согласно условию разделения суспензии в отстойнике, время пребывания частиц в аппарате должно быть равно времени осаждения частицы суспензии из верхней точки аппарата до осадка, т.е.

$$\frac{h}{w_{ос}} = \frac{lbh}{Q_{осв}}, \quad (4.84)$$

где h — высота осаждения; $w_{ос}$ — скорость осаждения частиц; l и b — соответственно длина и ширина отстойника; $Q_{осв}$ — объемный расход осветленной жидкости.

Величина $Q_{осв}$ с учетом уравнения (4.83) определится в виде

$$Q_{осв} = \frac{G_{осв}}{\rho_{осв}} = \frac{G_{см}}{\rho_{осв}} \frac{X_{см} - X_{ос}}{X_{осв} - X_{ос}}, \quad (4.85)$$

где $\rho_{осв}$ — плотность осветленной жидкости.

Теперь, учитывая, что произведение lb равно площади осаждения F , получаем

$$F = \frac{G_{см}}{W_{ос} \rho_{осв}} \left(\frac{X_{см} - X_{ос}}{X_{осв} - X_{ос}} \right). \quad (4.86)$$

Таким образом, при сделанных допущениях требуемая площадь осаждения F не зависит от высоты осаждения, а определяется лишь конечными концентрациями, общим расходом суспензии и скоростью осаждения.

Тем не менее в реальных условиях эффективности разделения, а значит, и требуемая площадь F зависят от высоты аппарата. Поэтому при расчете отстойников требуемую высоту аппарата h определяют как сумму высот зон с различной концентрацией твердой фазы: зоны осветления, зоны питания, промежуточной зоны, зоны уплотнения.

Непрерывное осаждение в поле центробежных сил. В промышленности существует целый ряд аппаратов для разделения неоднородных систем под действием центробежной силы, отличающихся конструкцией и принципом действия в зависимости как от типа разделяемой системы, так и от способа создания центробежной силы. В зависимости от способа создания центробежной силы различают два класса аппаратов. Это циклоны (гидроциклоны), где центробежная сила возникает вследствие закручивания потока, движущегося с большой скоростью, по спирали, и осадительные центрифуги, в которых центробежная сила создается благодаря вращению ротора. Обычно системы газ — твердое разделяют в циклонах, а системы жидкость — твердое — в гидроциклонах и центрифугах. Несмотря на значительные конструктивные различия аппаратов данного класса, возможно общее описание протекающих в них процессов разделения на основании баланса сил, действующих на частицы дисперсной фазы в центробежном поле.

На частицу, взвешенную в движущейся сплошной среде, действуют следующие силы: 1) центробежная $F_{ц} = mW^2/r$; 2) тяжести $F_T = mg$; 3) сопротивления среды $F_c = 3\pi d\mu_c W_{ос}$; 4) архимедова $F_A = \left(\frac{\rho}{\rho_{тв}}\right)\rho \frac{W^2}{r}$ (рис. 4.5).

В большинстве случаев силой тяжести F_T можно пренебречь. Тогда движение частицы в поле центробежных сил будет определяться соотношением центробежной силы $F_{ц}$, силы сопротивления F_c и архимедовой силы F_A . Будем выражать касательную составляющую скорости потока W через угловую скорость ($W = \omega r$), а скорость осаждения частицы $W_{ос}$, равную радиальной составляющей скорости, как производную радиальной составляющей пути по времени ($W_{ос} = -dr/dt$). Предположим далее, что частицы имеют одинаковый размер. Тогда в зависимости от режима осаждения возможны два случая: 1) осаждение характеризуется законом Стокса; 2) осаждение описывается общим законом сопротивления среды.

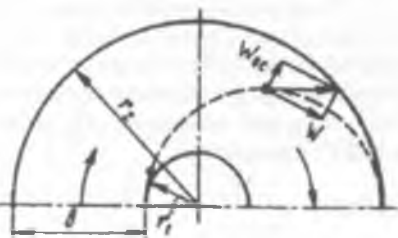


Рис. 4.5. Траектория движения частицы в центробежном аппарате

Рассмотрим первый случай. Для участка установившегося движения частиц условие равенства действующих сил

$$F_{ц} = F_{с} + F_{А} \quad (4.87)$$

дает следующее уравнение (в случае сферических частиц):

$$\frac{\pi d_{ч}^3}{6} \rho_{тв} \frac{[W(r)]^2}{r} = 3\pi d_{ч} \mu_{с} \frac{dr}{dr} + \frac{\pi d_{ч}^3}{6} \rho \frac{[W(r)]^2}{r} \quad (4.88)$$

Приводя подобные члены и выражая касательную составляющую скорости W через угловую ν , получаем

$$d_{ч}^2 (\rho_{тв} - \rho) \nu^2 r = 18 \mu_{с} \frac{dr}{dr} \quad (4.89)$$

Разделим переменные в уравнении (4.89) и проинтегрируем:

$$\frac{18 \mu_{с}}{d_{ч}^2 (\rho_{тв} - \rho) \nu^2} \int_{r_1}^{r_2} \frac{dr}{r} = \int_0^t dt \quad (4.90)$$

После интегрирования имеем

$$t = \frac{18 \mu_{с}}{d_{ч}^2 \nu^2 (\rho_{тв} - \rho)} \ln \frac{r_2}{r_1} \quad (4.91)$$

где r_1 и r_2 — соответственно внутренний и внешний радиусы аппарата.

Уравнение (4.91) отражает зависимость требуемого времени пребывания в аппарате для отделения частиц размером $d_{ч}$.

Разрешая последнее уравнение относительно размера частиц $d_{ч}$, можно оценить предельный размер частиц $d_{ч.пр}$, отделяемых в центробежном аппарате при заданном времени пребывания t :

$$d_{ч.пр} = \sqrt{\frac{18 \mu_{с}}{(\rho_{тв} - \rho) t \nu^2} \ln \frac{r_2}{r_1}} \quad (4.92)$$

Теоретически все частицы, имеющие размер выше предельного значения $d_{ч.пр}$, должны осаждаться, а все частицы с размером меньше $d_{ч.пр}$ — выноситься потоком из аппарата.

Полученные соотношения для времени пребывания частиц в аппарате t и предельного размера частиц $d_{ч.пр}$ выведены в предположении, что архимедова сила $F_{А}$ сопоставима по величине с центробежной силой $F_{ц}$. Это справедливо при разделении систем жидкость — твердое. В случае систем газ — твердое величиной $F_{А}$ можно пренебречь. Тогда уравнения (4.91) и (4.92) примут вид

$$t = \frac{18 \mu_{с}}{d_{ч}^2 \nu^2 \rho_{тв}} \ln \frac{r_2}{r_1} \quad (4.93)$$

$$d_{ч.пр} = \sqrt{\frac{18 \mu_{с}}{\rho_{тв} + \nu^2} \ln \frac{r_2}{r_1}} \quad (4.94)$$

Рассмотрим теперь случай, когда движение частиц в поле центробежных сил описывается общим законом сопротивления среды. Так как коэффициент сопротивления среды при движении частиц является функцией числа Рейнольдса, т.е. $\xi = \xi(\text{Re})$, то сила сопротивления среды F_c составит

$$F_c = \xi \frac{\pi d_{\text{ч}}^2}{4} \frac{W_{\text{ос}}^2}{2} \rho. \quad (4.95)$$

Как и в предыдущем случае, условие равенства центробежной силы сумме силы сопротивления и архимедовой силы дает

$$\frac{\pi d_{\text{ч}}^3}{6} \rho_{\text{ТВ}} \frac{[W(r)]^2}{r} = \xi \frac{\pi d_{\text{ч}}^2}{4} \frac{W_{\text{ос}}^2}{2} \rho + \frac{\pi d_{\text{ч}}^3}{6} \rho \frac{[W(r)]^2}{r}. \quad (4.96)$$

Подставляя в это уравнение $W(r) = rv$ и $W_{\text{ос}} = dr/dt$, получаем

$$\frac{d_{\text{ч}}}{3} (\rho_{\text{ТВ}} - \rho) v^2 r = \frac{\xi}{4} \rho \left(\frac{dr}{r} \right)^2. \quad (4.97)$$

Извлечем квадратный корень из правой и левой частей уравнения (4.97) и разделим переменные:

$$dr = \frac{1}{2v} \sqrt{\frac{3\xi\rho}{d_{\text{ч}}(\rho_{\text{ТВ}} - \rho)}} \frac{dr}{\sqrt{r}}. \quad (4.98)$$

После интегрирования последнего уравнения в пределах от 0 до t и от r_1 и r_2 получаем выражение для требуемого времени пребывания частиц в аппарате при условии их осаждения:

$$t = \frac{1}{v} \sqrt{\frac{3\xi\rho}{d_{\text{ч}}(\rho_{\text{ТВ}} - \rho)}} (\sqrt{r_2} - \sqrt{r_1}). \quad (4.99)$$

Если время пребывания частиц в аппарате известно, то, используя соотношение (4.99), можно определить предельный диаметр частиц $d_{\text{ч.пр}}$, осаждаемых при заданных условиях:

$$d_{\text{ч.пр}} = \frac{3\xi\rho}{v^2 t^2 (\rho_{\text{ТВ}} - \rho)} (\sqrt{r_2} - \sqrt{r_1})^2. \quad (4.100)$$

Для разделения систем газ — твердое в поле центробежных сил соотношения (4.99), (4.100) упрощаются, так как в этом случае архимедовой силой можно пренебречь:

$$t = \frac{1}{v} \sqrt{\frac{3\xi\rho}{d_{\text{ч}}\rho_{\text{ТВ}}}} (\sqrt{r_2} - \sqrt{r_1}). \quad (4.101)$$

$$d_{\text{ч.пр}} = \frac{3\xi\rho}{v^2 t^2 \rho_{\text{ТВ}}} (\sqrt{r_2} - \sqrt{r_1})^2. \quad (4.102)$$

§ 4.4. Периодическое расслаивание неоднородных жидких смесей

Разделение жидких неоднородных смесей отстаиванием — один из распространенных процессов в химической технологии. Данным методом обычно разделяют грубые (первичные) дисперсии. Этот метод экономичен, но в то же время аппаратура для проведения гравитационного отстаивания обычно имеет большие размеры. Характерной особенностью процесса отстаивания является низкая скорость движения фаз, что обеспечивает наиболее благоприятные условия осаждения. Поэтому при рассмотрении данных процессов часто делают допущение "ползущего потока" (т.е. пренебрегают инерционными членами в уравнении движения). Рассматривая процесс отстаивания с физической точки зрения, выделим два основных явления, характеризующих его. Это, как правило, стесненное движение капель дисперсной фазы в ходе отстаивания и взаимодействие капель (коалесценция) между собой. Поэтому при построении адекватной математической модели процесса отстаивания необходимо учесть в рамках одной модели оба явления.

Конструктивно отстаивание (декантацию) неоднородных жидких смесей проводят периодически либо непрерывно в аппаратах двух типов: 1) горизонтального типа (с горизонтальным течением смеси по аппарату); 2) вертикального типа.

Исходя из физического представления процесса расслаивания жидких неоднородных смесей, рассмотрим зонную модель расслаивания с различным характером движения капель дисперсной фазы (рис. 4.6). Выделим следующие зоны: зону чистой сплошной фазы (1), зону стесненного движения капель (2), зону плотной упаковки капель (3) и зону чистой дисперсной фазы (4).

Такое представление позволяет учесть явления стесненности движения дисперсной фазы и взаимодействие капель между собой (коалесценцию). По существу, будем рассматривать не весь столб жидкости, а лишь зоны стесненного движения и плотной упаковки, так как процесс расслаивания определяется явлениями, происходящими в них.

В зоне 2 происходит стесненное движение капель дисперсной фазы вследствие вязких взаимодействий между ними и концентрация дисперсной фазы непрерывно растет в сторону плотной упаковки капель. Для зоны 3 характерен постоянный контакт капель друг с другом, при котором происходит постепенное утончение пленки сплошной фазы и ее разрыв с последующей коалесценцией. Наряду с коалесценцией капель внутри зоны на ее границе с чистой дисперсной фазой происходит коалесценция капель через поверхность раздела фаз. Скорость движения

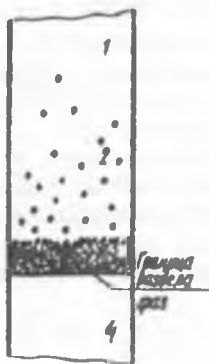


Рис. 4.6. Зонное представление расслаивания

капель в зоне 3 постоянна и определяется величиной потока дисперсной фазы, коалесцирующей через поверхность раздела.

Модель движения дисперсной фазы в зоне 2 включает уравнение неразрывности и уравнение, определяющее скорость движения капель. С учетом взаимодействия капель друг с другом запишем уравнение неразрывности в зоне 2 для капель объемом v :

$$\frac{\partial C(t, x, v)}{\partial t} + \frac{\partial [u(t, x, v) C(t, x, v)]}{\partial x} = \\ = \frac{\lambda}{2} \int_0^v C(t, x, v - v^*) C(t, x, v^*) dv^* - \\ - \lambda \int_0^{v_m} C(t, x, v) C(t, x, v^*) dv^*. \quad (4.103)$$

Здесь $C(t, x, v)$ — число капель объемом v в дм^3 ; $u(t, x, v)$ — скорость движения капель объемом v ; t — время; x — вертикальная координата; v_m — максимальный объем капель в системе.

Первый интеграл в правой части уравнения (4.103) характеризует прирост капель объемом v за счет коалесценции более мелких капель, а второй — их убыль вследствие коалесценции капель объемом v с другими каплями. Константа λ пропорциональна вероятности коалесценции капель при их столкновении и определяется из условия минимального отклонения экспериментальных и расчетных данных изменения функции распределения частиц по размерам по высоте зоны осаждения (всплывания).

Более строго, λ (ядро коалесценции) является функцией объемов сталкивающихся капель v_1, v_2 и преобладающего механизма столкновений (коалесценция либо турбулентного). Таким образом,

$$\lambda = \lambda(v_1, v_2). \quad (4.104)$$

В зависимости от вида функции (4.104) различают линейные ядра и нелинейные ядра. В линейном приближении справедливо рассматриваемое ниже решение. Для нелинейного случая решение сильно усложняется.

При малых значениях критерия Рейнольдса для частиц дисперсной фазы ($Re_4 < 5$) движение жидкости относительно частиц можно рассматривать как ползущее (можно пренебречь инерционными членами в уравнении движения).

Тогда с учетом вытеснения сплошной фазы запишем следующее уравнение для скорости движения частиц объемом v в зоне 2:

$$u(t, x, v) + \frac{\int_0^{v_m} C(t, x, v) u(t, x, v) dv}{1 - C_0} = U_{\text{вз}}(v, M_1, M_2, M_3, C_0). \quad (4.105)$$

В уравнении (4.105) $U_{\text{вз}}$ — взвешивающая скорость движения частиц относительно жидкости, зависящая от объема рассматриваемого сорта частиц v , первых трех моментов функции распределения частиц по размерам

M_1, M_2, M_3 , общей концентрации частиц C_0 и учитывающая вязкие взаимодействия частиц между собой.

Уравнение неразрывности для зоны 3 имеет вид

$$\frac{\partial f(t, x, v)}{\partial t} + u \frac{\partial f(t, x, v)}{\partial x} = \frac{\lambda'}{2} \int_0^v f(t, x, v - v^*) \times \\ \times f(t, x, v^*) dv^* - \lambda' \int_0^v f(t, x, v) f(t, x, v^*) dv^*. \quad (4.106)$$

Так как в зоне 3 (зоне плотной упаковки) капли находятся в постоянном контакте друг с другом, то их скорость движения u может быть принята одинаковой для всех объемов капель и по всей высоте зоны и определяется величиной потока дисперсной фазы $Q_{гр}$, коалесцирующей через поверхность раздела:

$$u = \frac{Q_{гр}}{\eta}. \quad (4.107)$$

Поток дисперсной фазы $Q_{гр}$, коалесцирующий через поверхность раздела, определяется функцией распределения капель по объему $f_{гр}(v)$, поверхностной эффективностью упаковки капель у границы раздела $\eta_{гр}$, временем коалесценции $\tau_{гр}(v)$ и диаметром коалесцирующих капель d :

$$Q_{гр} = \int_0^{v_m} \frac{2\eta_{гр} f_{гр}(v) d}{3\tau_{гр}(v)} dv. \quad (4.108)$$

Подынтегральное выражение в уравнении (4.108) определяет количество дисперсной фазы, переносимой через единичную поверхность раздела фаз в единицу времени вследствие коалесценции капель объемом v . Для определения времени коалесценции одиночной капли объемом v через границу раздела фаз воспользуемся эмпирическим соотношением

$$\tau_0(v) = 1,32 \cdot 10^5 \mu\tau^{-1,32} (9,81\Delta\rho)^{0,32} (6v/\pi)^{0,4867}. \quad (4.109)$$

Для коалесценции капель в слое толщиной ΔH у поверхности раздела фаз необходимо учитывать эффект подавливания капель друг на друга. В этом случае время коалесценции τ определяется выражением

$$\tau = \tau_0 - K\eta \frac{\Delta H}{V_0}, \quad (4.110)$$

где τ_0 — время коалесценции одиночной капли; K — экспериментально определяемая константа; η — объемная эффективность упаковки капель (доля объема, занятая каплями); V_0 — поток дисперсной фазы.

Изменение высоты зоны чистой дисперсной фазы H_c и зоны плотной упаковки капель H_3 при протекании расплавления определим с помощью уравнений

$$\frac{dH_c}{dt} = Q_{гр}(t), \quad (4.111)$$

$$\frac{dH_2}{dt} = \frac{Q_d - Q_{гр}}{\eta} \quad (4.112)$$

и следующих начальных условий:

$$H_1 = H_2 = 0 \quad \text{при } t = 0. \quad (4.113)$$

Поток дисперсной фазы у верхней границы зоны плотной упаковки Q_d в уравнении (4.112) есть

$$Q_d = \int_0^{u_m} v C(t, x, v) u(t, x, v) dv. \quad (4.114)$$

Систему уравнений (4.103) – (4.114), описывающую периодическое расслаивание эмульсий, решают с помощью конечно-разностного метода с использованием схемы расщепления по времени. Соответствующая разностная форма уравнения (4.103) имеет вид

$$\frac{\bar{c}_y - c_y^*}{\tau} + u_{ij} \frac{\bar{c}_y - \bar{c}_{i-1,j}}{h} + \bar{c}_y \frac{u_y - u_{i-1,j}}{h} = 0, \quad (4.115)$$

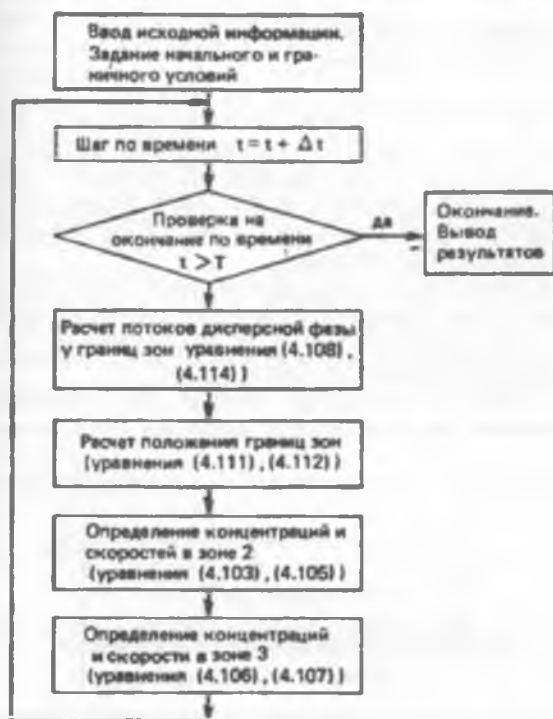


Рис. 4.7. Блок-схема расчета периодического расслаивания

$$\frac{C_{ij} - \bar{C}_{ij}}{\tau} - \frac{\lambda}{2} \sum_{k=1}^l \bar{C}_{i, l-k} \bar{C}_{l, k} + \lambda \sum_{k=1}^m \bar{C}_{ij} \bar{C}_{lk} = 0, \quad (4.116)$$

где C_{ij} — концентрация частиц в момент t ; C_{ij} — концентрация частиц в момент $t + \tau$; $\bar{C}_{ij}$ — промежуточная концентрация частиц; τ и h — соответствующие приращения по времени и координате.

Аналогичная разностная схема записывается и для уравнения (4.105). Начальные и граничные условия для уравнений (4.115), (4.116) имеют вид

$$C_{ij} = C \quad \text{при } i = 0, \quad 0 \leq x < H, \quad (4.117)$$

$$C_{ij} = 0 \quad \text{при } x = 0, \quad 0 \leq i < T. \quad (4.118)$$

Блок-схема решения системы уравнений (4.103)–(4.114) приведена на рис. 4.7, а в приложении 2 дана программа расчета периодического расщепления неоднородных жидких смесей САР.

§ 4.5. Непрерывное расщепление в аппаратах с горизонтальным течением

Данный тип аппаратов распространен в химической и нефтехимической промышленности. Рассмотрим модель таких аппаратов, основанную на уже рассмотренном зонном представлении протекания процесса. В основе модели также лежат уравнения баланса числа частиц с учетом их коагуляции и распределения по размерам. На рис. 4.8 представлена схема горизонтального аппарата (декантатора).

Исходная двухфазная смесь в количестве G_0 поступает в декантатор, где она по мере горизонтального течения разделяется на два слоя: верхний легкий слой, отбираемый в количестве G_1 с верха аппарата, и нижний тяжелый, отбираемый в количестве G_2 с низа.

Модель движения дисперсной фазы в зоне стесненного движения включает уравнение неразрывности и уравнения, определяющие скорость

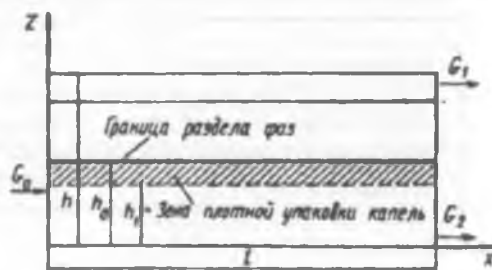


Рис. 4.8. Схема горизонтального декантатора для расщепления эмульсий

движения капель. С учетом взаимодействия капель друг с другом запишем уравнение неразрывности (баланса капель) для капель объемом v в зоне:

$$u_x \frac{\partial C(x, z, v)}{\partial x} + \frac{\partial [C(x, z, v)u_z]}{\partial z} = \frac{\lambda}{2} \int_0^v C(x, z, v-v^*) \chi$$

$$\chi C(x, z, v^*) dv^* - \lambda \int_0^{v^*} C(x, z, v) C(x, z, v^*) dv^*, \quad (4.119)$$

а также следующие граничные условия

$$C(0, z, v) = C_1(v) \quad \text{при } x = 0, \quad h_2 < z < h_1, \quad (4.120)$$

$$C(x, 0, v) = C_2(v) \quad \text{при } z = h_2, \quad 0 \leq x < l. \quad (4.121)$$

Здесь $C(x, z, v)$ — частичная функция плотности распределения капель дисперсной фазы по объемам; u_x, u_z — соответственно горизонтальная и вертикальная составляющие скорости; x, y, z — координаты; h_1 — расстояние до границы зоны плотной упаковки капель; h_2 — высота зоны чистой сплошной фазы при $x = 0$; l — длина декантатора.

Первый и второй интегралы в правой части уравнения (4.119) характеризуют соответственно прибыль капель объемом v благодаря коалесценции более мелких капель и их убыль вследствие коалесценции капель объемом v с другими каплями.

Для определения горизонтальной составляющей скорости движения дисперсной фазы u_x будем рассматривать горизонтальное течение двухфазной смеси как квазигомогенное. Такое допущение справедливо, когда частицы имеют малый размер и отношение вязкостей невелико. Тогда для ламинарного горизонтального потока квазигомогенной смеси по декантатору можно использовать решение уравнений Навье—Стокса для ламинарного течения жидкости в открытом канале прямоугольного сечения, причем свойства жидкости выражаются через свойства фаз. В этом случае профиль горизонтальной составляющей скорости $u_x(z)$ по высоте канала определяется так:

$$u_x(z) = \frac{2}{b} \int_0^{b/2} u_x(z, y) dy. \quad (4.122)$$

$$u_x(z, y) = \frac{8\pi^2}{2v} h^2 \left[1 - \frac{(h-z)^2}{h^2} - \frac{32}{\pi^3} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)^3} \chi \right. \\ \left. \chi \left(\left(\operatorname{ch} \frac{2n+1}{2} \frac{\pi y}{h} / \left(\operatorname{ch} \frac{2n+1}{2} \frac{\pi b}{2h} \right) \right) \cos \frac{2n+1}{2} \frac{\pi(h-z)}{h} \right) \right], \quad (4.123)$$

где b — ширина декантатора; h — высота слоя жидкости в декантаторе; ν — кинематическая вязкость; z — наклон канала.

Величина гидравлического наклона канала z определяется выра-

$$z = \frac{G_0 3\nu}{bh^3 g} \frac{1}{\left(1 - \frac{192}{\pi^3} \frac{2h}{b} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)^3} \operatorname{th} \frac{2n+1}{2} \frac{\pi b}{2h}\right)} \quad (4.124)$$

Вертикальную составляющую скорости дисперсной фазы u_z найдем как разность скорости движения частиц относительно жидкости (взвешивающая скорость $U_{вз}$) и противоположно направленной вертикальной составляющей скорости сплошной фазы.

$$u_z(x, z, v) = U_{вз}(v, M_1, M_2, M_3, C_0) - \frac{\int_0^{v_M} C(x, z, v) u_z(x, z, v) v dv}{1 - C_0} \quad (4.125)$$

Как уже отмечалось, взвешивающая скорость с учетом стесненности движения капель определяется через моменты функции распределения капель по размерам M_1, M_2, M_3 , объем капель v и общую объемную концентрацию капель φ .

Уравнение неразрывности потока дисперсной фазы в зоне плотной упаковки капель имеет вид

$$u_x \frac{\partial f(x, z, v)}{\partial x} + u_z \frac{\partial f(x, z, v)}{\partial z} = \frac{\lambda^*}{2} \int_0^{v_M} f(x, z, v - v^*) \times \\ \times f(x, z, v^*) dv^* - \lambda^* \int_0^{v_M} f(x, z, v) f(x, z, v^*) dv^*, \quad (4.126)$$

а граничные условия таковы:

$$f(0, z, v) = f_0(v) \quad \text{при } x=0, \quad h_1 \leq z \leq h_0. \quad (4.127)$$

$$f(x, h_1, v) = f_{гр}(v) \quad \text{при } z=h_1, \quad 0 < x < l. \quad (4.128)$$

Здесь $f(x, z, v)$ — функция плотности распределения капель по объемам в зоне плотной упаковки; h_0 — расстояние до границы раздела фаз.

Так как в зоне плотной упаковки капли находятся в постоянном контакте друг с другом, то вертикальная составляющая скорости их движения u_z может быть принята одинаковой для всех объемов капель по всей высоте зоны и определяется величиной потока дисперсной фазы $Q_{гр}$, коалесцирующей через поверхность раздела, и объемной эффективностью упаковки капель дисперсной фазы η :

$$u_z = \frac{Q_{гр}}{\eta}. \quad (4.129)$$

Поток дисперсной фазы $Q_{гр}$, коалесцирующей через поверхность раздела, определяется функцией распределения капель по объему $f_{гр}(x, v)$, поверхностной эффективностью упаковки капель у границы раздела $\eta_{гр}$, временем коалесценции $\tau_{гр}(v)$ и диаметром коалесцирующих капель d :

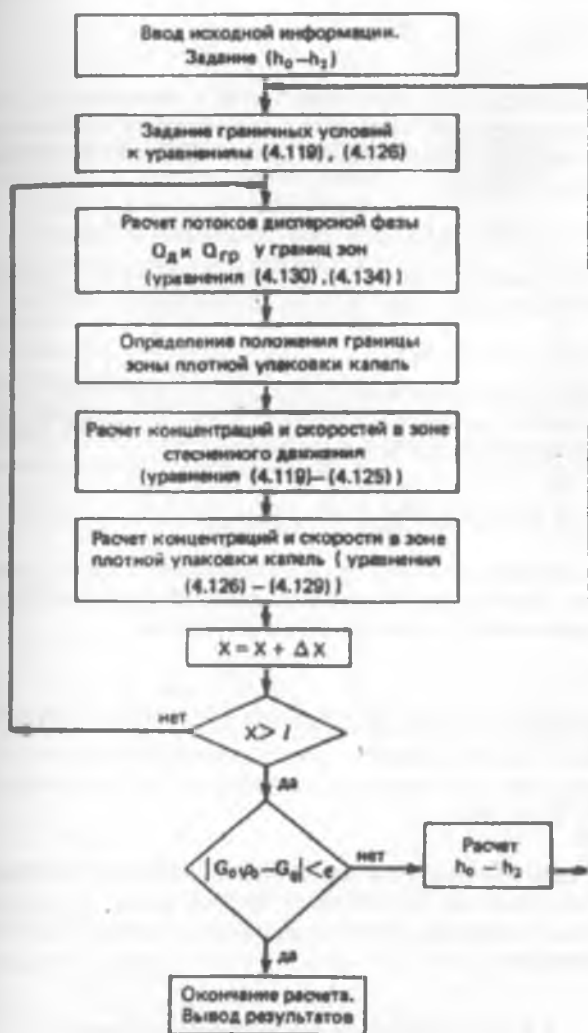


Рис. 4.9. Блок-схема расчета непрерывного расслоения

$$Q_{гp}(x) = \int_0^{v_m} \frac{2\eta_{гp} f_{гp}(x, v) d}{3\tau_{гp}(v)} dv. \quad (4.130)$$

Время коалесценции капли — поверхность раздела фаз $\tau_{гp}(v)$ зависит от объема капли v , физических свойств и высоты зоны плотной упаковки капель $h_0 - h_1$:

$$\tau_{гр}(v) = \tau_0(v) - K \frac{\eta(h_0 - h_1)}{Q_{гр}} \quad (4.131)$$

Время коалесценции одиночной капли у поверхности раздела $\tau_0(v)$ может быть рассчитано по одному из эмпирических соотношений, определяющих зависимость времени коалесценции капли от физических свойств фаз и диаметра капли:

$$\tau_0(v) = 1,32 \cdot 10^5 \mu\gamma^{-1,32} (9,81 \Delta\rho)^{0,32} (6v/\pi)^{0,4867} \quad (4.132)$$

Для стационарных условий процесса расслаивания высота зоны плотной усадки капель $(h_0 - h_1)$ должна удовлетворять условию

$$Q_d(x) = Q_{гр}(x, h_0 - h_1) \quad (4.133)$$

Величина потока дисперсной фазы $Q_d(x)$ в уравнении (4.133) зависит от концентрации и скорости движения частиц у границы зоны плотной усадки капель и определяется выражением

$$Q_d(x) = \int_0^{v_m} v C(x, h_1, v) u_z(x, h_1, v) dv \quad (4.134)$$

Высота дисперсии $h_0 - h_2$ при $x = 0$ определяет общее количество дисперсной фазы, проходящее в единицу времени через декантатор в вертикальном направлении G_d , и определяется из условия

$$G_0 \varphi_0 = G_d \quad (4.135)$$

где φ_0 — объемная доля дисперсной фазы в питании, а количество дисперсной фазы G_d есть

$$G_d = b \int_0^l Q_d(x) dx \quad (4.136)$$

Замкнутую систему уравнений (4.119)–(4.136), описывающую непрерывное расслаивание гетерофазной жидкой смеси при горизонтальном течении, решают с помощью конечно-разностного метода. Блок-схема решения приведена на рис. 4.9.

§ 4.6. Непрерывное расслаивание в аппаратах вертикального типа

Для данного типа аппаратов гравитационного расслаивания жидких неоднородных смесей отсутствует горизонтальная составляющая скорости, а распределение дисперсной фазы внутри любого горизонтального сечения аппарата постоянно.

На рис. 4.10 приведена схема декантатора вертикального типа (иногда декантаторы вертикального типа называют флорентийскими сосудами).

Исходную смесь подают в среднюю часть декантатора, а отстаившиеся фазы отбирают из нижней и верхней частей аппарата. Для описания процесса расслаивания будем пользоваться уже рассмотренным зонным представлением протекания процесса. Остановимся подробнее на описании расслаивания внутри каждой из зон.

В зоне стесненного движения дисперсной фазы справедливо следующее уравнение неразрывности потока капель объемом v с учетом взаимодействия в дисперсной фазе:

$$\frac{\partial [C(z, v) u_z]}{\partial z} = \frac{\lambda}{2} \int_0^{v_M} C(z, v - v^*) C(z, v^*) dv^* - \lambda \int_0^{v_M} C(z, v) C(z, v^*) dv^* \quad (4.137)$$

с граничным условием

$$C(h_2, v) = C_0(v) \quad \text{при} \quad z = h_2. \quad (4.138)$$

Скорость движения капель дисперсной фазы u_z определим как разность между скоростью движения капель относительно сплошной фазы $U_{вз}$ (взвешивающая скорость) и скоростью движения сплошной фазы u_{zc} :

$$u_z = U_{вз} - u_{zc}. \quad (4.139)$$

Выражение для взвешивающей скорости $U_{вз}$ имеет вид

$$U_{вз} = U_0/\lambda, \quad (4.140)$$

$$\lambda = 1 + \alpha d + \frac{1}{3} (\alpha^2 d^2). \quad (4.141)$$

$$c = \frac{\{6\pi M_2 + [36\pi^2 M_2^2 + 24\pi M_1(1 - 3C_0/2)]^{1/2}\}}{2 - 3C_0}. \quad (4.142)$$

а скорость сплошной фазы с учетом присутствия капель дисперсной фазы определяется через объемный поток сплошной фазы $Q_{сф}$ и объемную долю дисперсной фазы φ следующим образом:

$$u_{zc} = \frac{Q_{сф}}{1 - \varphi}. \quad (4.143)$$

Завишем уравнение неразрывности потока капель дисперсной фазы объемом v в зоне плотной упаковки капель с учетом постоянства скорости движения капель:

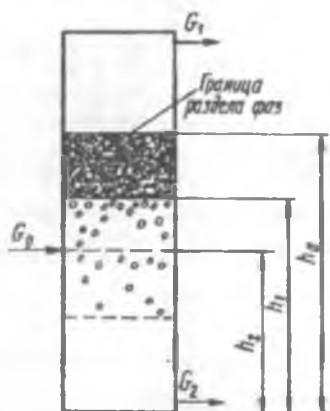


Рис. 4.10. Схема декантатора вертикального типа

$$u_z \frac{\partial f(z, v)}{\partial z} = \frac{\lambda^*}{2} \int_0^v f(z, v - v^*) f(z, v^*) dv^* - \lambda^* \int_0^{v_M} f(z, v) f(z, v^*) dv^*, \quad (4.144)$$

причем граничное условие имеет вид

$$f(h_1, v) = f_0(v) \quad \text{при } z = h_1. \quad (4.145)$$

Скорость движения капель в зоне плотной упаковки есть

$$u_z = \frac{Q_{гр}}{\eta}. \quad (4.146)$$

где η — объемная эффективность упаковки капель дисперсной фазы.

В стационарных условиях поток дисперсной фазы в декантаторе должен быть постоянным по высоте колонны.

В частности, это означает, что

$$Q_d = Q_{гр} [(h_0 - h_1)], \quad (4.147)$$

где поток дисперсной фазы Q_d у границы зоны плотной упаковки определяется выражением

$$Q_d = \int_0^{v_M} v C(h_1, v) u_z(h_1, v) dv. \quad (4.148)$$

Уравнение (4.148) позволяет определить высоту зоны плотной упаковки капель $(h_0 - h_1)$.

Глава V

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛООБМЕННЫХ ПРОЦЕССОВ

Теплообменом называют самопроизвольный процесс переноса теплоты, возникающий под действием пространственной неоднородности поля температуры.

Количественной мерой переноса теплоты является вектор плотности теплового потока q , указывающий направление переноса и численно равный количеству теплоты, проходящему за единицу времени через единицу поверхности, нормальной к направлению переноса.

Важнейшей задачей расчета теплообменных аппаратов является определение поля температуры $T(t, x, y, z)$, а также нахождение потоков теплоты $q(t, x, y, z)$. Если известно поле плотности потока q , то нетрудно подсчитать суммарный перенос теплоты Q через любую поверхность F :

$$Q = \int (\vec{q}_F \cdot \vec{n}_F) dF, \quad (5.1)$$

где $\vec{n}_F$ — единичный вектор нормали к поверхности F . В качестве поверхности обычно рассматривают твердые стенки, обтекаемые теплоносителем, и поверхности раздела фаз (как при конденсации и испарении).

Математическая формулировка задач теплообмена базируется на законах переноса и законах сохранения. Соответствующие краевые условия определяют начальное состояние исследуемого объекта и его взаимодействие с окружающей средой.

Теория теплообмена основывается на модели непрерывной (сплошной) среды. Это означает, что межмолекулярные расстояния считаются много меньшими характерных размеров рассматриваемой системы и даже ее элементарных объемов.

Рассмотрим законы переноса энергии. Как уже указывалось, поток энергии возникает вследствие неоднородности поля температур. Мерой пространственной неоднородности поля температур является градиент температуры $\text{grad } T$, указывающий направление максимального возрастания температуры и численно равный производной от температуры по этому направлению:

$$\text{grad } T = n_0 \frac{\partial T}{\partial n} = i \frac{\partial T}{\partial x} + j \frac{\partial T}{\partial y} + k \frac{\partial T}{\partial z}, \quad (5.2)$$

где n_0 — единичный вектор нормали к изотермической поверхности $T(t, x, y, z) = \text{const}$, ориентированный в сторону возрастания температуры;

$\frac{\partial T}{\partial x}, \frac{\partial T}{\partial y}, \frac{\partial T}{\partial z}$ — проекции градиента температуры на оси прямоугольной системы координат.

Для переноса теплоты в покоящихся недеформируемых однокомпонентных средах, изучаемого в теории теплопроводности, закон переноса устанавливает связь между молекулярным потоком теплоты, с одной стороны, и градиентом температуры — с другой. Для большинства возникающих на практике задач справедливо линейное соотношение между этими величинами, устанавливаемое законом теплопроводности Фурье:

$$q_T = -\lambda \text{grad } T, \quad (5.3)$$

где λ — теплопроводность среды.

В движущихся газах и жидкостях происходит конвективный теплообмен. Здесь к молекулярному переносу добавляется конвекция — перенос вещества, импульса и энергии макроскопическими объемами среды, перемещающимися с некоторой скоростью u . При этом вектор скорости и выступает как расходная характеристика: ее численное значение равно объему вещества, переносимому за единицу времени через единицу поверхности, нормальной к направлению скорости. Умножая скорость u на плотность ρ (или на удельную теплоту q_k), получаем конвективный поток теп-

$$q_k = \rho h u, \quad (5.4)$$

где ρ — плотность вещества; h — энтальпия.

Таким образом, при конвективном теплообмене плотность теплового потока q определяется суммой молекулярной и конвективной составляющих:

$$q = q_T + q_k = -\lambda \text{grad } T + \rho h u. \quad (5.5)$$

Наряду с рассмотренными видами переноса энергии существует перенос энергии электромагнитными волнами. При этом предполагается, что поглощение лучистой энергии приводит к изменению теплового состояния тела, точно так же как и излучение определяется тепловым состоянием (температурой) тела. Если среда, разделяющая поверхности с различной температурой, прозрачна для теплового излучения, то радиационный и конвективный теплообмен происходят параллельно независимо один от другого. Результирующие потоки лучистой энергии определяются в этом случае только геометрией системы, температурой и радиационными свойствами поверхностей тел.

В случае сильно поглощающей и излучающей среды для радиационной составляющей потока энергии справедливо выражение градиентного типа:

$$q_{\text{рад}} \sim \text{grad } (T^4). \quad (5.6)$$

Совместный (комбинированный) перенос теплоты с участием трех механизмов переноса энергии, т.е. теплопроводности, конвекции и излучения, называют *сложным теплообменом*.

§ 5.1. Конвективный теплообмен

Уравнения конвективного теплообмена. *Конвективным теплообменом* (или *теплоотдачей*) называется процесс переноса теплоты между поверхностью твердого тела и движущейся сплошной средой. При этом, как уже отмечалось, перенос теплоты осуществляется одновременным действием теплопроводности и конвекции.

Явление теплопроводности определяется коэффициентом теплопроводности и температурным градиентом. Иначе обстоит дело с явлением конвекции — вторым элементарным видом распространения теплоты. Здесь процесс переноса теплоты неразрывно связан с переносом самой среды.

По природе возникновения различают два вида движения — свободное и вынужденное. *Свободным* называется движение, происходящее вследствие разности плотностей нагретых и холодных частиц в гравитационном поле. *Вынужденное* движение возникает под действием посторонних возбудителей, например насоса, вентилятора и т.д. В общем случае наряду с вынужденным движением одновременно может развиваться и свободное.

Интенсивность конвективного теплообмена характеризуется коэффициентом теплоотдачи α , который определяется по формуле Ньютона-Рихмана

$$Q = \alpha(T_c - T_{ж})F. \quad (5.7)$$

Согласно этому закону тепловой поток Q пропорционален поверхности теплообмена F и разности температур стенки и жидкости $(T_c - T_{ж})$.

Коэффициент теплоотдачи можно определить как количество теплоты, отдаваемое в единицу времени единицей поверхности при разности температур между поверхностью и жидкостью, равной одному градусу:

$$\alpha = \frac{Q}{F(T_c - T_{ж})}. \quad (5.8)$$

В общем случае коэффициент теплоотдачи может изменяться вдоль поверхности теплообмена, и поэтому различают средний по поверхности коэффициент теплоотдачи и местный (локальный) коэффициент теплоотдачи.

Процессы теплоотдачи неразрывно связаны с условиями движения среды. Как известно, имеются два основных режима течения: ламинарный и турбулентный. Переход ламинарного режима в турбулентный происходит при критическом значении числа Рейнольдса $Re_{кр}$. Например, при движении жидкости в трубах $Re_{кр} = 2 \cdot 10^3$.

Одной из причин возникновения турбулентности является потеря устойчивости ламинарного течения, сопровождающаяся образованием вихрей. Различают естественную и искусственную турбулентность. Первая устанавливается естественно и для случая течения внутри гладкой трубы вполне определяется значением числа Re . Вторая вызывается искусственным путем вследствие наличия в потоке каких-либо преград. Однако при любом виде турбулентности в тонком слое у поверхности из-за наличия вязкого трения течение жидкости затормаживается и скорость падает до нуля. Этот слой принято называть *вязким подслоем*.

Для процессов теплоотдачи режим движения рабочей жидкости имеет очень большое значение, так как им определяется механизм переноса теплоты. При ламинарном режиме перенос теплоты в направлении нормали к стенке в основном осуществляется вследствие теплопроводности. При турбулентном режиме такой способ переноса теплоты сохраняется лишь в вязком подслое, а внутри турбулентного ядра перенос осуществляется благодаря интенсивному перемешиванию частиц жидкости. В этих условиях для газов и обычных жидкостей интенсивность теплоотдачи в основном определяется термическим сопротивлением пристенного подслоя, которое по сравнению с термическим сопротивлением ядра оказывается определяющим. Следовательно, как для ламинарного, так и для турбулентного режима течения вблизи самой поверхности применим закон Фурье (уравнение (5.3)).

Процесс теплоотдачи является сложным процессом, а коэффициент теплоотдачи — сложной функцией различных величин, характеризующих

этот процесс. В общем случае коэффициент теплоотдачи является функцией формы Φ , размеров $l_1, l_2, \dots$, температуры поверхности нагрева T_c , скорости движения u и температуры жидкости $T_{ж}$, физических свойств жидкости — коэффициента теплопроводности λ , удельной теплоемкости c_p , плотности ρ , коэффициента вязкости μ и других факторов:

$$\alpha = f(u, T_c, T_{ж}, \lambda, c_p, \rho, \mu, \Phi, l_1, l_2, \dots). \quad (5.9)$$

В большинстве случаев в ходе конвективного теплообмена определяющие величины меняются во времени и в пространстве. Поэтому установление зависимости между ними представляет собой весьма трудную задачу. Тогда, применяя общие законы сохранения и переноса субстанции, ограничиваются установлением связи между переменными (координатами, временем и физическими свойствами), которая охватывает небольшой промежуток времени и элементарный объем пространства. Полученная таким образом зависимость является общим дифференциальным уравнением рассматриваемого процесса. После интегрирования этого уравнения получают аналитическую зависимость между величинами для всей области интегрирования.

Такие дифференциальные уравнения могут быть составлены и для процесса теплоотдачи. Так как теплоотдача определяется не только тепловыми, но и гидродинамическими явлениями, то совокупность этих явлений описывается системой дифференциальных уравнений, в которую входят уравнение теплопроводности, уравнение движения и уравнение сплошности.

Дифференциальное уравнение теплопроводности Фурье—Кирхгофа записывается в виде

$$\frac{DT}{dt} = \frac{\lambda}{c_p \rho} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) = a \Delta^2 T \quad (5.10)$$

или

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} + u_x \frac{\partial T}{\partial x} + u_y \frac{\partial T}{\partial y} + u_z \frac{\partial T}{\partial z} = \\ = a \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right). \end{aligned} \quad (5.11)$$

Уравнение (5.10) устанавливает связь между временными и пространственными изменениями температуры в любой точке движущейся среды; здесь a — коэффициент температуропроводности и Δ^2 — оператор Лапласа.

В уравнении (5.11) наряду с температурой T имеются еще три переменные u_x, u_y и u_z . Это говорит о том, что в движущейся среде температурное поле зависит еще и от распределения скоростей. Последнее описывается дифференциальным уравнением движения, вывод которого основан на втором законе Ньютона: сила равна массе, умноженной на ускорение. Для проекций равнодействующих сил на оси x, y и z имеем

$$\rho \frac{\partial u_x}{\partial t} + \rho \left(u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_x}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_x}{\partial z} \right) =$$

$$= \rho g_x - \frac{\partial P}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \right), \quad (5.12)$$

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial u_y}{\partial t} + \rho \left(u_x \frac{\partial u_y}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_y}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_y}{\partial z} \right) = \\ = \rho g_y - \frac{\partial P}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} \right), \end{aligned} \quad (5.13)$$

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial u_z}{\partial t} + \rho \left(u_x \frac{\partial u_z}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_z}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) = \\ = \rho g_z - \frac{\partial P}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \right). \end{aligned} \quad (5.14)$$

Здесь g_x, g_y, g_z — ускорения движения в направлении x, y, z соответственно.

Уравнения (5.12)–(5.14) являются дифференциальными уравнениями движения Навье—Стокса в случае несжимаемой вязкой жидкости.

Так как в уравнениях (5.12)–(5.14) появилась новая неизвестная — давление P , то число неизвестных в уравнениях (5.11)–(5.14) больше числа уравнений, т.е. система оказалась незамкнутой. Чтобы получить замкнутую систему, необходимо к имеющимся уравнениям присоединить еще одно — уравнение сплошности, которое выводится на основе закона сохранения массы и имеет вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho u_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho u_z)}{\partial z} = 0. \quad (5.15)$$

Полученная система дифференциальных уравнений (5.11)–(5.15) для процессов конвективного теплообмена охватывает бесчисленное множество процессов теплоотдачи. Для выделения из этого множества рассматриваемого процесса необходимо добавить условия однозначности или краевые условия.

Условия однозначности состоят из:

геометрических условий, характеризующих форму и размеры системы, в которой протекает процесс;

физических условий, характеризующих физические свойства среды и тела;

граничных условий, характеризующих особенности протекания процесса на границах тела;

временных условий, характеризующих особенности протекания процесса во времени.

Если условия однозначности для какого-либо конкретного случая заданы, то они вместе с системой дифференциальных уравнений составляют математическое описание данного процесса. Тем самым после решения системы уравнений можно получить полное описание процесса во всех деталях: поля температур, скоростей, давлений и т.д.

Для инженерных расчетов обычно основной интерес представляет коэффициент теплоотдачи, который определяется из уравнения (5.8). При известном поле температур определение коэффициента теплоотдачи основывается на следующих рассуждениях.

Поток теплоты, передаваемый от среды к стенке, проходит через слой, прилегающий к поверхности, вследствие теплопроводности и может быть определен по закону Фурье:

$$dQ = -\lambda \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right) dF. \quad (5.16)$$

С другой стороны, для того же элемента поверхности закон Ньютона-Рихмана записывается в виде

$$dQ = \alpha (T_c - T_{\text{ж}}) dF. \quad (5.17)$$

Приравняв правые части этих уравнений, получим

$$\alpha = - \frac{\lambda}{T_c - T_{\text{ж}}} \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right). \quad (5.18)$$

Это уравнение, позволяющее по известному полю температур в среде определить коэффициент теплоотдачи, называется *уравнением теплоотдачи*.

Итак, математическое описание процесса теплоотдачи состоит из: 1) уравнения теплопроводности; 2) уравнения движения; 3) уравнения сплошности; 4) уравнения теплоотдачи; 5) условий однозначности.

К настоящему времени аналитические решения системы дифференциальных уравнений конвективного теплообмена получены лишь для ограниченного числа простейших задач при введении тех или иных упрощающих допущений. Такое положение объясняется большой сложностью уравнений или в конечном счете сложностью и самих процессов.

Поэтому вследствие ограниченности возможностей аналитического решения приведенных выше дифференциальных уравнений изучение процессов теплоотдачи часто ведется экспериментальным путем.

Теплоотдача без изменения агрегатного состояния теплоносителя. Рассмотрим сначала теплоотдачу при течении жидкости в трубах. При вынужденном течении жидкости внутри трубы различают два режима течения: ламинарный и турбулентный. При ламинарном течении перенос теплоты от одного слоя жидкости к другому в направлении нормали к стенке происходит благодаря теплопроводности. В то же время каждый слой имеет в общем случае различную скорость продольного движения. Поэтому наряду с поперечным переносом теплоты вследствие теплопроводности происходит также конвективный перенос теплоты в продольном направлении. В силу этого теплообмен при ламинарном режиме течения зависит от гидродинамической картины движения.

Для расчета среднего коэффициента теплоотдачи

$$\bar{\alpha} = \frac{Q}{F (\bar{T}_{\text{ж}} - \bar{T}_c)} = \frac{\bar{q}}{\bar{T}_{\text{ж}} - \bar{T}_c} \quad (5.19)$$

необходимо в общем случае знать средние по длине трубы значения температуры жидкости $T_{ж}$ и стенки $T_{с}$.

Величина и характер изменения локального коэффициента теплоотдачи вдоль длины трубы зависит от целого ряда факторов, таких, как профиль температуры жидкости на входе, начальный профиль скорости и условия входа жидкости в трубу, характер изменения температуры стенки по длине трубы.

Значения среднего коэффициента теплоотдачи по длине трубы влиянию упомянутых выше условий подвержены в меньшей степени, так как в процессе осреднения влияние отдельных факторов сглаживается.

Значительное влияние на интенсивность теплоотдачи может оказывать зависимость физических свойств жидкости (в первую очередь вязкости) от температуры. Изменение температуры по сечению трубы приводит к изменению вязкости; при этом чем больше перепады температур, тем сильнее меняются вязкость и другие физические параметры (теплопроводность, теплоемкость) по сечению трубы. Изменение вязкости приводит к изменению профиля скорости, что в свою очередь отражается на интенсивности теплообмена.

В зависимости от направления теплового потока изменение профиля скорости оказывается различным. При охлаждении жидкости ее температура у стенки ниже, а вязкость выше, чем в ядре потока. Поэтому по сравнению с изотермическим течением в этих условиях скорость движения жидкости у стенки ниже, а в ядре потока выше. При нагревании жидкости, наоборот, скорость течения жидкости у стенки выше, а в ядре потока ниже. На практике обычно скорость и температура на входе в трубу имеют профили, близкие к равномерным. Для этих условий расчет среднего коэффициента теплоотдачи при ламинарном режиме течения жидкости в трубах при отношении длины трубы l к ее диаметру d , равном $l/d \geq 10$, и $Re_{ж} > 10$ можно проводить по формуле

$$\overline{Nu}_{d_{ж}} = 1,4 (Re_{d_{ж}} \frac{d}{l})^{0,4} Pr_{ж}^{0,33} (\frac{Pr_{ж}}{Pr_{с}})^{0,25}, \quad (5.20)$$

где

$$\overline{Nu}_{d_{ж}} = \frac{\bar{\alpha} d}{\lambda_{ж}}; Re_{d_{ж}} = \frac{ud}{\nu_{ж}}; Pr_{ж} = \frac{\nu_{ж}}{\alpha_{ж}}; Pr_{с} = \frac{\nu_{с}}{\alpha_{с}}; \quad (5.21)$$

Индексы "ж" и "с" означают, что физические свойства выбираются по средней температуре жидкости и стенки соответственно.

Множитель $(Pr_{ж}/Pr_{с})^{0,25}$ учитывает зависимость физических свойств (в основном вязкости) от температуры и влияние направления теплового потока.

Приведенное соотношение относится к условиям, когда влияние подъемных сил не проявляется.

При значительном изменении температуры по сечению и длине трубы в разных точках потока плотности жидкости или газа оказываются различными. Вследствие этого в жидкости возникают подъемные силы, под действием которых на вынужденное движение теплоносителя накладывается сво-

бодное движение. В итоге изменяются картина движения жидкости и интенсивность теплоотдачи. В большинстве случаев изменение профиля скоростей теплоносителя благодаря свободному движению приводит к возрастанию среднего коэффициента теплоотдачи.

В настоящее время для расчета теплоотдачи при одновременном действии вынужденной и свободной конвекции используют частные эмпирические формулы, примером которых является уравнение (5.115).

Рассмотрим теперь теплоотдачу при турбулентном режиме. В этом случае перенос теплоты внутри жидкости осуществляется в основном благодаря перемешиванию. При этом процесс перемешивания протекает настолько интенсивно, что по сечению ядра потока температура жидкости практически постоянна. Резкое изменение температуры наблюдается лишь внутри тонкого слоя у поверхности.

На основе анализа и обобщения результатов многочисленных исследований по теплоотдаче при турбулентном течении была установлена следующая зависимость для расчета среднего коэффициента теплоотдачи:

$$\overline{Nu}_{d_{ж}} = \frac{\bar{\alpha} d_{ж} d_2}{\lambda_{ж}} = 0,021 Re_{d_{ж}}^{0,8} Pr_{ж}^{0,43} \left(\frac{Pr_{ж}}{Pr_c} \right)^{0,25} \epsilon_1. \quad (5.22)$$

За определяющую температуру здесь принята средняя температура жидкости $\bar{T}_{ж}$, а за определяющий размер — эквивалентный диаметр d_2 (для труб круглого сечения эквивалентный диаметр равен геометрическому).

Коэффициент ϵ_1 учитывает изменение коэффициента теплоотдачи вдоль длины трубы (если $l/d > 50$, то $\epsilon_1 = 1$).

Из анализа формулы (5.22) следует, что при турбулентном режиме течения коэффициент теплоотдачи в наибольшей степени зависит от скорости движения теплоносителя и от его плотности ρ (пропорционально $(\rho \mu)^{0,8}$). Кроме того, теплоотдача зависит от физических свойств среды (теплопроводности, теплоемкости, вязкости) и геометрического размера канала.

При движении жидкости в изогнутых трубах неизбежно возникает центробежный эффект. Поток жидкости отжимается к внешней стенке и в поперечном сечении возникает так называемая вторичная циркуляция. С увеличением радиуса кривизны R влияние центробежного эффекта уменьшается и в пределе при $R \rightarrow \infty$ оно совсем исчезает. Вследствие возрастания скорости и вторичной циркуляции и вытекающего из этого увеличения турбулентности потока значение среднего коэффициента теплоотдачи в изогнутых трубах выше, чем в прямых.

Расчет теплоотдачи в изогнутых трубах производят по формулам для прямой трубы с последующим введением в качестве множителя поправочного коэффициента ϵ_R , который для эмсеевских труб определяется соотношением

$$\epsilon_R = 1 + 1,77 \frac{d}{R}. \quad (5.23)$$

где R — радиус эмсеевика; d — диаметр трубы.

Рассмотрим, наконец, теплоотдачу при поперечном обтекании труб. В этом случае процесс теплоотдачи имеет ряд особенностей, которые объясняются гидродинамической картиной движения жидкости вблизи поверхности труб. Опыт показывает, что плавный безотрывный характер обтекания труб имеет место только при очень малых числах Рейнольдса ($Re < 5$). При больших числах Re , характерных для практики, обтекание труб всегда сопровождается образованием в кормовой части вихревой зоны, что в значительной мере отражается на теплоотдаче. При этом коэффициент теплоотдачи в наибольшей степени зависит от скорости набегающего потока, вязкости и теплопроводности и в меньшей степени от теплоемкости и вязкости жидкости. Кроме того, коэффициент теплоотдачи существенно зависит от температуры жидкости, температурного напора и направления теплового потока. При нагревании капельной жидкости значение коэффициента теплоотдачи всегда выше, чем при охлаждении.

В результате анализа и обобщения существующих экспериментальных данных для расчета среднего по периметру трубы коэффициента теплоотдачи получены следующие зависимости:

если $Re_{ж} < 10^3$, то

$$Nu_{ж} = 0,56 \cdot Re_{ж}^{0,50} Pr_{ж}^{0,36} \left(\frac{Pr_{ж}}{Pr_c} \right)^{0,25}, \quad (5.24)$$

если $Re_{ж} > 10^3$, то

$$Nu_{ж} = 0,28 \cdot Re_{ж}^{0,6} Pr_{ж}^{0,36} \left(\frac{Pr_{ж}}{Pr_c} \right)^{0,25}. \quad (5.25)$$

В качестве определяющего размера в уравнениях (5.24), (5.25) взят внешний диаметр труб.

Для воздуха зависимости (5.24), (5.25) упрощаются и принимают такой вид:

если $Re < 10^3$, то

$$Nu = 0,49 \cdot Re^{0,50}; \quad (5.26)$$

если $Re > 10^3$, то

$$Nu = 0,245 \cdot Re^{0,60}. \quad (5.27)$$

Соотношения (5.24) — (5.27) справедливы, если угол атаки φ , составляющий направление движения потока и осью трубы, равен 90° . Если угол атаки φ отличается от 90° , то коэффициент теплоотдачи становится иным, причем с уменьшением угла атаки он убывает. Расчетная формула для коэффициента теплоотдачи в этом случае принимает вид

$$\alpha = \epsilon \cdot \alpha_{\varphi=90^\circ}, \quad (5.28)$$

где ϵ — коэффициент, учитывающий величину угла атаки.

Процесс теплоотдачи еще более усложняется, если в поперечном потоке жидкости имеется не одна труба, а пучок труб. В технике распростра-

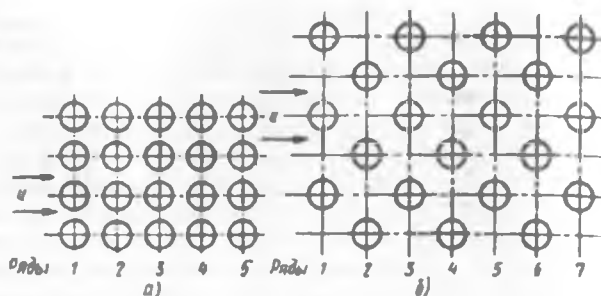


Рис. 5.1. Схемы расположения труб в коридорных (а) и шахматных (б) пучках

существуют два основных типа трубных пучков — коридорный и шахматный (рис. 5.1).

Характеристиками пучка являются диаметр труб и относительные расстояния между их осями.

Теплоотдача труб в пучке, а также изменение теплоотдачи по окружности в основном определяются характером обтекания. При изменении условий омывания меняется и теплоотдача.

В зависимости от типа пучка, диаметра труб, расстояния между ними, температуры жидкости и других факторов проведено большое количество исследований по изучению теплоотдачи. На основе результатов этих работ можно сделать ряд общих выводов. Теплоотдача первого ряда различна и определяется начальной турбулентностью потока. Теплоотдача второго и третьего рядов по сравнению с первым постепенно возрастает. Если теплоотдачу третьего ряда принять за 100 %, то в шахматных и коридорных пучках теплоотдача первого ряда составляет всего лишь около 60 %, а второго — в коридорных пучках около 90 % и в шахматных — около 70 %. Причиной возрастания теплоотдачи является увеличение турбулентности потока. По абсолютному значению теплоотдача в шахматных пучках выше, чем в коридорных, что обуславливается лучшим перемешиванием.

По результатам обобщения опытных данных для расчета среднего коэффициента теплоотдачи рекомендуются следующие соотношения:

Коридорные пучки труб:

если $Re_{\text{ж}} < 10^3$, то

$$Nu_{\text{ж}} = 0,56 \cdot Re_{\text{ж}}^{0,5} \cdot Pr_{\text{ж}}^{0,36} \left(\frac{Pr_{\text{ж}}}{Pr_c} \right)^{0,25}, \quad (5.29)$$

если $Re_{\text{ж}} > 10^3$, то

$$Nu_{\text{ж}} = 0,22 \cdot Re_{\text{ж}}^{0,65} \cdot Pr_{\text{ж}}^{0,36} \left(\frac{Pr_{\text{ж}}}{Pr_c} \right)^{0,25}. \quad (5.30)$$

Шахматные пучки труб:

если $Re_{\text{ж}} < 10^3$, то

$$Nu_{\text{ж}} = 0,56 \cdot Re_{\text{ж}}^{0,5} \cdot Pr_{\text{ж}}^{0,36} \left(\frac{Pr_{\text{ж}}}{Pr_c} \right)^{0,25}; \quad (5.31)$$

если $Re_{\text{ж}} > 10^3$, то

$$Nu_{\text{ж}} = 0,40 \cdot Re_{\text{ж}}^{0,60} \cdot Pr_{\text{ж}}^{0,36} \left(\frac{Pr_{\text{ж}}}{Pr_c} \right)^{0,25}. \quad (5.32)$$

Для воздуха расчетные формулы упрощаются и принимают такой вид:

коридорные пучки труб:

$$Nu_{\text{ж}} = 0,49 \cdot Re_{\text{ж}}^{0,5}; \quad (5.33)$$

если $Re_{\text{ж}} > 10^3$, то

$$Nu_{\text{ж}} = 0,194 \cdot Re_{\text{ж}}^{0,65}; \quad (5.34)$$

шахматные пучки труб:

если $Re < 10^3$, то

$$Nu = 0,49 \cdot Re^{0,5}; \quad (5.35)$$

если $Re > 10^3$, то

$$Nu = 0,35 \cdot Re^{0,60}. \quad (5.36)$$

Соотношения (5.29) – (5.32) применимы лишь для случая, когда поток жидкости перпендикулярен оси пучка, т.е. когда угол атаки $\varphi = 90^\circ$. Однако на практике не менее часты случаи, когда $\varphi < 90^\circ$. Проще всего изменение теплоотдачи при изменении угла атаки можно учесть, введя поправочный коэффициент ϵ_φ , представляющий собой отношение коэффициента теплоотдачи при угле атаки φ к коэффициенту теплоотдачи при $\varphi = 90^\circ$. Расчетная формула при этом имеет следующий вид:

$$\alpha = \epsilon_\varphi \cdot \alpha_{\varphi=90^\circ}. \quad (5.37)$$

На основании ряда исследований установлено, что значение коэффициента ϵ_φ является функцией угла атаки φ :

$\varphi, \dots$	90	80	70	60	50	40	30	20	10
$\epsilon_\varphi, \dots$	1	1	0,98	0,94	0,88	0,78	0,67	0,52	0,42

Теплоотдача при изменении агрегатного состояния теплоносителя. Рассмотрим сначала теплообмен при кипении жидкостей. Процесс кипения происходит, когда давление насыщенного пара вещества равно внешнему давлению. При этом необходимым условием передачи теплоты от твердой поверхности к кипящей жидкости является перегрев поверхности относительно температуры насыщения. При малых разностях температур стенки и жидкости ($\Delta T = T_c - T_n$) пузырьки пара зарождаются в малом числе центров парообразования, их перемещающий эффект для всей поверхности теплообмена оказывается незначительным и интенсивность тепло-

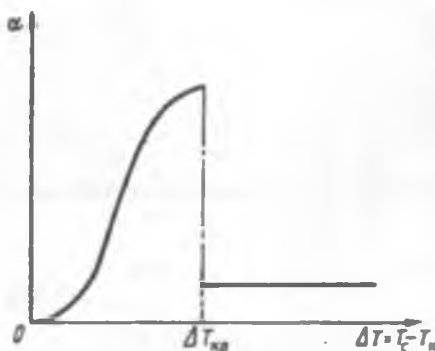


Рис. 5.2. Зависимость коэффициента теплоотдачи от разности температур между стенкой и кипящей жидкостью

новится настолько большим, что они начинают занимать заметную долю всей теплообменной поверхности, а это ввиду малой теплопроводности пара приводит к уменьшению темпа роста коэффициента теплоотдачи (область приближения к максимуму на кривой рис. 5.2).

При некотором значении $\Delta T = \Delta T_{кр}$ пузырьки у поверхности перестают отрываться индивидуально и сливаются в сплошную паровую пленку, блокирующую горячую стенку от жидкости. Интенсивность теплоотдачи падает настолько резко, что переход от пузырькового режима кипения к пленочному называют *кризисом кипения*. Значение коэффициента теплоотдачи уменьшается в 20–40 раз, что может привести к нежелательному прерыву теплообменной поверхности. Одной из распространенных простых формул, описывающих кризис теплоотдачи, является полуэмпирическая зависимость

$$q_{кр} = K_{rk} \sqrt{\rho_n} [\sigma (\rho_n - \rho_g)]^{1/4}, \quad (5.38)$$

где r — удельная теплота испарения; σ — поверхностное натяжение; ρ_n , ρ_g — плотности жидкости и пара соответственно; значение эмпирической константы K находится в пределах 0,13–0,19 и зависит от свойств греющей поверхности и ее ориентации.

Пленочный режим кипения всегда нежелателен, и в промышленной практике стараются проводить процесс в области развитого пузырькового кипения достаточной интенсивности.

Таким образом, механизм пузырькового кипения имеет наиболее существенное значение для анализа процесса теплообмена при кипении.

По степени влияния общего объема жидкости на интенсивность теплоотдачи различают кипение в большом объеме не перемещаемой неподвижно жидкости и кипение в направленном потоке жидкости. Анализ процессов развитого пузырькового кипения даже в более простом случае большого объема чистой жидкости оказывается настолько сложным, что

в настоящее время не сформулирована однозначная система уравнений и граничных условий, адекватно отражающих все многообразие взаимосвязанных факторов, определяющих развитие процесса кипения. Особую сложность представляют условия на подвижной границе жидкая фаза — паровой пузырь.

Остановимся несколько подробнее на теплообмене при пузырьковом кипении. Наблюдения показывают, что при увеличении температурного напора $\Delta T = T_c - T_n$, а также давления на поверхности нагрева увеличивается число активных центров парообразования. В результате непрерывно возникает, растет и отрывается от поверхности нагрева все большее количество пузырьков. Вследствие этого увеличиваются турбулизация и перемещение пристенного пограничного слоя жидкости. В процессе своего роста на поверхности нагрева пузырьки также интенсивно забирают теплоту из пограничного слоя. Все это способствует улучшению теплоотдачи. Наблюдения, проведенные с применением скоростной киносъемки, показывают, что при фиксированном режиме кипения частота образования паровых пузырьков оказывается неодинаковой как в различных точках поверхности, так и во времени. Это придает процессу кипения стохастический характер. Соответственно скорости роста и отрывные размеры различных пузырьков также характеризуются случайными отклонениями относительно средних величин.

При увеличении температурного напора (или теплового потока) постепенно начинает развиваться процесс слияния отдельных пузырьков с образованием больших вторичных пузырей и целых паровых "столбов". Около поверхности среднее объемное содержание пара возрастает до 60—80 %. Однако в очень тонком поверхностном слое у самой стенки по-прежнему преобладает жидкая фаза. Термическое сопротивление этого слоя в основном и определяет интенсивность теплоотдачи при развитом пузырьковом кипении. Эффективная толщина слоя по мере увеличения тепловой нагрузки снижается, что приводит к увеличению интенсивности теплоотдачи.

Экспериментальные данные показывают, что интенсивность теплоотдачи растет при увеличении плотности теплового потока и давления. Эта закономерность характерна для любых жидкостей, смачивающих поверхность нагрева. В то же время при развитом пузырьковом кипении теплоотдача меняется в зависимости от состояния материала, чистоты поверхности нагрева и практически не зависит от размеров и формы теплоотдающей поверхности.

Обычно на практике перечисленные эффекты проявляются одновременно. Это затрудняет точное определение теплоотдачи.

При развитом кипении связь между α и q может быть представлена в виде степенной зависимости с показателем степени $2/3$:

$$\alpha = Cq^{2/3}. \quad (5.39)$$

Соответственно зависимость ΔT от q определяется соотношением

$$\Delta T = \frac{1}{C} q^{1/3}, \quad (5.40)$$

где C — коэффициент пропорциональности, значение которого зависит от рода жидкости и давления, а также в некоторой степени от поверхностных условий.

Проведенные экспериментальные исследования показали следующую зависимость коэффициента C от физических свойств жидкости:

$$C = b \left(\frac{\lambda^2}{\nu \sigma T_n} \right)^{1/3}, \quad (5.41)$$

где коэффициент b определяется выражением

$$b = 0,075 \left[1 + 10 \left(\frac{\rho_n}{\rho_{ж} - \rho_n} \right)^{2/3} \right]. \quad (5.42)$$

Все свойства в формуле (5.41) следует брать при температуре насыщения T_n .

Опыты показывают, что при вынужденном движении жидкости закономерности теплоотдачи при развитом пузырьковом кипении подчиняются приведенным соотношениям (5.39) — (5.42).

Рассмотрим теперь теплообмен при конденсации паров. Основным способом осуществления перехода из паровой фазы в жидкую является конденсация паров на охлаждаемых поверхностях. При этом характер конденсации зависит от угла смачиваемости материала поверхности жидкостью: если образующийся конденсат смачивает поверхность, то он растекается по ней сплошной пленкой (пленочная конденсация); несмачивающий поверхность конденсат образует на ней отдельные капли (капельная конденсация). В дальнейшем будем рассматривать пленочную конденсацию как наиболее распространенную в промышленной практике.

На поверхности, которая контактирует с насыщенным паром и имеет температуру, меньшую, чем температура пара, образуется сплошная пленка конденсата, стекающая вниз под действием силы тяжести. При конденсации пара выделяется теплота фазового перехода, которая передается стенке через термическое сопротивление пленки. Кроме того, имеется термическое сопротивление на поверхности контакта паровой и жидкой фаз. Однако в большинстве случаев все термическое сопротивление сосредоточено в пленке конденсата.

Толщина пленки конденсата и гидродинамический режим течения этой пленки зависят от соотношения сил тяжести, вязкого трения, инерции, а также от количества образующегося конденсата и расположения поверхности конденсации.

В процессе пленочной конденсации вся теплота, выделяющаяся на внешней границе пленки, отводится к поверхности охлаждения. При ламинарном движении жидкостной пленки перенос теплоты через нее осуществляется лишь благодаря теплопроводности. Если принять, что температура конденсата, соприкасающегося с паром, равна температуре T_n насыщения, то

Интенсивность теплового потока q определяется выражением

$$q = \frac{\lambda}{\delta} (T_n - T_c), \quad (5.43)$$

где δ — толщина пленки; λ — коэффициент теплопроводности конденсата; T_n — температура поверхности.

С другой стороны, согласно закону Ньютона,

$$q = a(T_n - T_c). \quad (5.44)$$

Из сопоставления выражений (5.43) и (5.44) имеем

$$a = \frac{\lambda}{\delta}. \quad (5.45)$$

Следовательно, определение коэффициента теплоотдачи сводится к определению толщины пленки конденсата δ , которая может быть получена из анализа условий течения.

Рассмотрим плоскую вертикальную поверхность (рис. 5.3). Ось x расположена в плоскости стенки и направлена вниз, а ось y направлена перпендикулярно стенке. Температура стенки T_c считается постоянной по высоте. Дифференциальное уравнение движения для единичного объема конденсата в пленке имеет вид

$$\kappa(\rho_{\text{ж}} - \rho_{\text{п}}) + \mu \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} = 0. \quad (5.46)$$

В этом уравнении сила тяжести единичного объема конденсата $g(\rho_{\text{ж}} - \rho_{\text{п}})$ уравновешивается силой вязкости, действующей со стороны соседних слоев жидкости. Сила инерции, связанная с ускорением движения конденсата, как величина малая, не учитывается. Интегрирование уравнения (5.46) дает

$$u_x = - \frac{\kappa(\rho_{\text{ж}} - \rho_{\text{п}})}{2\mu} y^2 + C_1 y + C_2. \quad (5.47)$$

Постоянные интегрирования определяются из граничных условий:

$$u_x = 0 \text{ при } y = 0,$$

$$\partial u_x / \partial y = 0 \text{ при } y = \delta.$$

Отсюда следует, что $C_2 = 0$ и $C_1 = g(\rho_{\text{ж}} - \rho_{\text{п}})\delta/\mu$.

Подставляя значения C_1 и C_2 в выражение (5.47), получаем закон распределения скоростей в слое конденсата:

$$u_x = g \frac{\rho_{\text{ж}} - \rho_{\text{п}}}{\mu} \left(y\delta - \frac{1}{2} y^2 \right). \quad (5.48)$$

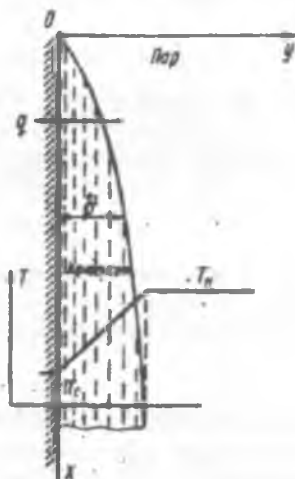


Рис. 5.3. Пленочная конденсация на вертикальной стенке

Количество жидкости, протекающей в единицу времени через сечение x при ширине стенки, равной единице, определяется формулой

$$G = \rho_{\text{ж}} \int_0^{\delta} u_x dy = \rho_{\text{ж}} \bar{u}_x \delta = g \frac{\rho_{\text{ж}} - \rho_{\text{п}}}{3\nu} \delta^3. \quad (5.49)$$

Отсюда

$$\delta = \sqrt[3]{\frac{3G\nu}{g(\rho_{\text{ж}} - \rho_{\text{п}})}}, \quad (5.50)$$

т.е. толщина пленки увеличивается с ростом G расхода жидкости в пленке, причем $\delta \sim G^{1/3}$.

Количество конденсата G может быть получено из уравнения теплового баланса для участка длиной x при единичной ширине стенки:

$$Q = \int_0^x q dx = \bar{q}x = rG, \quad (5.51)$$

где Q — тепловой поток, переданный стенке на участке $0x$.

Подставляя в (5.51) значение G из уравнения (5.49) и величину q из уравнения (5.43), получаем

$$\lambda(T_{\text{н}} - T_{\text{с}}) \int_0^x \frac{dx}{\delta} = rg \frac{(\rho_{\text{ж}} - \rho_{\text{п}})}{3\nu} \delta^3. \quad (5.52)$$

Это уравнение содержит одну неизвестную величину — толщину пленки δ . Поскольку при $x = 0$ толщина пленки должна быть равна нулю, можно искать решение уравнения (5.52) в виде

$$\delta = Bx^n. \quad (5.53)$$

Подставляя это выражение в уравнение (5.52), имеем

$$\frac{\lambda(T_{\text{н}} - T_{\text{с}})}{B} \frac{x^{1-n}}{1-n} = rg \frac{\rho_{\text{ж}} - \rho_{\text{п}}}{3\nu} B^3 x^{3n}. \quad (5.54)$$

Соотношение (5.54) должно выполняться при любом x ; следовательно, показатели степени при x слева и справа в выражении (5.54) должны быть одинаковы. Отсюда

$$1 - n = 3n, \quad (5.55)$$

или

$$n = 1/4. \quad (5.56)$$

Далее из выражения (5.54) сразу находим величину B :

$$B = \sqrt[4]{\frac{4\lambda(T_{\text{н}} - T_{\text{с}})\nu}{rg(\rho_{\text{ж}} - \rho_{\text{п}})}}. \quad (5.57)$$

Таким образом, окончательно получим

$$\delta = \sqrt[4]{\frac{4\lambda(T_{\text{н}} - T_{\text{с}})\nu x}{rg(\rho_{\text{ж}} - \rho_{\text{п}})}}. \quad (5.58)$$

Зная выражение для толщины пленки, определяем локальный коэффициент теплоотдачи

$$\alpha = \frac{\lambda}{\delta} = \frac{\sqrt[4]{\lambda^3 r_k (\rho_{ж} - \rho_{п})}}{4 (T_{п} - T_c) \nu x} \quad (5.59)$$

Среднее значение коэффициента теплоотдачи для вертикальной стенки или вертикальной трубы высотой h определяется формулой

$$\bar{\alpha} = \frac{1}{h} \int_0^h \alpha dx = \frac{4}{3} \sqrt[4]{\frac{\lambda^3 r_k (\rho_{ж} - \rho_{п})}{4 (T_{п} - T_c) \nu h}} = 0,943 \frac{A}{\sqrt[4]{h \Delta T}}, \quad (5.60)$$

где

$$\Delta T = T_{п} - T_c, \quad (5.61)$$

$$A = \sqrt[4]{\frac{\lambda^3 r_k (\rho_{ж} - \rho_{п})}{\nu}}. \quad (5.62)$$

Из уравнения (5.60) следует, что средний коэффициент теплоотдачи уменьшается с ростом высоты h и температурного напора ΔT .

В случае горизонтальной трубы аналогичные рассуждения приводят к следующему выражению для среднего коэффициента теплоотдачи:

$$\bar{\alpha} = 0,728 \frac{A}{\sqrt[4]{D \Delta T}}, \quad (5.63)$$

где D — диаметр трубы.

Отметим, что в ориентировочных расчетах коэффициент теплоотдачи от конденсирующегося насыщенного пара к стенке можно принять равным $10000 \frac{\text{ккал}}{\text{м}^2 \cdot \text{ч} \cdot \text{К}}$.

При конденсации перегретого пара в отличие от конденсации насыщенного пара необходимо учитывать теплоту перегрева относительно температуры насыщения. Поток теплоты к охлаждаемой поверхности определяется выражением

$$q = -\lambda \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right) \Big|_{y=0} = [r_k + c(T - T_{п})] M + \alpha_{п} (T - T_{п}), \quad (5.64)$$

где $(\partial T / \partial y) |_{y=0}$ — поперечный градиент температуры в пленке конденсата; M — масса конденсирующегося пара; T — температура перегретого пара; $\alpha_{п}$ — коэффициент теплоотдачи от перегретого пара к наружной поверхности пленки, имеющей температуру насыщения $T_{п}$.

Коэффициент теплоотдачи при конденсации перегретого пара можно определять из соотношения

$$\frac{\alpha_{п}}{\alpha_{н}} = \left[\frac{1 + \frac{c}{r_k} (T - T_{п})}{1 + (q_{п}/q)} \right]^{0.25} \quad (5.65)$$

где $\alpha_{н}$ — коэффициент теплоотдачи насыщенного пара при ламинарном течении пленки; $q_{п} = \alpha_{п} (T - T_{п})$ — теплота, подводимая к пленке конден-

сата вследствие конвективной теплоотдачи от несконденсированной части перегретого пара.

В случае полной конденсации пара ($q_n = 0$) зависимость (5.65) упрощается:

$$\alpha_n = \alpha_n \left[1 + \frac{c}{r_k} (T - T_n) \right]^{0,25}. \quad (5.66)$$

§ 5.2. Учет стохастической составляющей при описании процесса теплообмена

Сложность описания и расчета теплообмена с учетом реальных условий его протекания во многом объясняет тот факт, что в настоящее время теплообменную аппаратуру рассчитывают по моделям, предполагающим режим полного вытеснения теплоносителя, либо его полное смешение. Эти крайние случаи режимов течения теплоносителя обоснованы для определенных конструкций теплообменных аппаратов и видов теплоотдачи. Однако в большинстве случаев использование модели идеального смешения и вытеснения теплоносителя дает погрешность в расчете. В связи с этим возникает необходимость использования более реальных моделей движения теплоносителей, обладающих одновременно достаточной простотой.

В реальном теплообменном аппарате в силу стохастической природы процесса распределение элементов потока по времени пребывания всегда неравномерно. К наиболее существенным источникам такой неравномерности можно отнести: неравномерность профиля скоростей системы; турбулизацию потоков; наличие застойных областей в потоке; образование каналов и байпасных токов в системе. Для оценки неравномерности потоков вводят функцию распределения по времени пребывания, которая определяется из отклика системы на импульсное, ступенчатое, либо частотное возмущение и позволяет количественно оценить отклонение реального потока от моделей идеального смешения и вытеснения. Численные характеристики отклика системы на возмущение (среднее значение, дисперсия и др.) позволяют рассчитать параметры моделей, учитывающих стохастическую природу процесса. Сюда следует отнести диффузионную и ячеечную модели.

Распределение температуры в потоке жидкости, возникающее вследствие ее движения, может быть также адекватно описано с помощью ранее рассмотренных моделей движения потоков. При этом концентрация вещества в потоке заменяется другой характеристикой — температурой.

Рассмотрим нагрев потока в аппарате системы "труба в трубе" конденсирующимся паром при температуре T_1 . Схема теплообменного аппарата приведена на рис. 5.4.

Модель идеального вытеснения. В основе этой модели лежат следующие допущения: 1) постоянство температуры в поперечном сечении; 2) отсутствие продольного перемешивания.

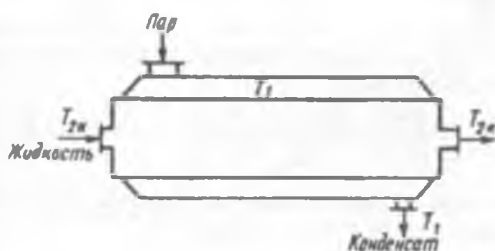


Рис. 5.4. Схема теплообменного аппарата

Математическое описание модели имеет вид

$$v_2 \frac{dT}{dx} = \frac{K\Pi(T_1 - T)}{Sc_{p_2}}, \quad (5.67)$$

где v_2 — скорость течения нагреваемого хладагента; K — коэффициент теплопередачи; Π и S — периметр нагреваемой поверхности и площадь поперечного сечения внутренней трубы; c_{p_2} — теплоемкость хладагента; x — расстояние от входа в теплообменник.

Интегрирование уравнения (5.67) дает следующее выражение для температуры хладагента на расстоянии x от входа:

$$T = T_1 - (T_1 - T_{2н}) e^{-\frac{K\Pi}{Sc_{p_2} v_2} x}. \quad (5.68)$$

Модель идеального смешения. Эта модель предполагает полное смешение хладагента. Поэтому его температура является постоянной по длине теплообменника. Температура, до которой можно нагреть хладагент, определяется из следующего уравнения теплового баланса:

$$G_2 c_{p_2} (T_{2к} - T_{2н}) = KF(T_1 - T_{2к}). \quad (5.69)$$

Ячеистая модель. Здесь поток хладагента представляется разделенным на ряд последовательно соединенных ячеек идеального смешения. Математическое описание модели включает уравнения теплового баланса для каждой из ячеек:

$$\begin{aligned} G_2 c_{p_2} (T_2^{(1)} - T_{2н}) &= \frac{KF}{n} (T_1 - T_2^{(1)}), \\ G_2 c_{p_2} (T_2^{(2)} - T_2^{(1)}) &= \frac{KF}{n} (T_1 - T_2^{(2)}), \\ &\dots \dots \dots \\ G_2 c_{p_2} (T_{2к} - T_2^{(n-1)}) &= \frac{KF}{n} (T_1 - T_{2к}). \end{aligned} \quad (5.70)$$

Решение системы уравнений (5.70) позволяет рассчитать изменение температуры по ячейкам.

Диффузионная модель. Основой для составления математической модели является модель идеального вытеснения, остоженная об-
ратным перемешиванием

$$-D_1 \frac{d^2 T}{dx^2} + v_2 \frac{dT}{dx} = \frac{KP(T_1 - T)}{Sc_{p2}}, \quad (5.71)$$

где D_1 — коэффициент продольного перемешивания в потоке теплоносителя.
Решение уравнения (5.71) имеет вид

$$T = C_1 e^{s_1 x} + C_2 e^{s_2 x} + T_1, \quad (5.72)$$

где

$$s_{1,2} = \frac{-v_2 \pm \sqrt{v_2^2 + 4D_1 \frac{KP}{Sc_{p2}}}}{-2D_1}. \quad (5.73)$$

Константы C_1 , C_2 можно найти из следующих граничных условий:

$$T = T_{2н} \text{ при } x = 0, \quad (5.74)$$

$$\frac{dT}{dx} = 0 \text{ при } x = L.$$

В результате получим

$$C_1 = T_{2н} - T_1 - \frac{s_1 L (T_1 - T_{2н})}{s_2 e^{s_2 L} - s_1 e^{s_1 L}}, \quad (5.75)$$

$$C_2 = \frac{s_1 e^{s_1 L} (T_1 - T_{2н})}{s_2 e^{s_2 L} - s_1 e^{s_1 L}}. \quad (5.76)$$

Пример. Оценим теперь профиль температуры хладагента для случая
нагрева жидкости конденсирующимся паром, исходя из различных моделей
движения хладагента. Условия теплообмена следующие: расход жидкости

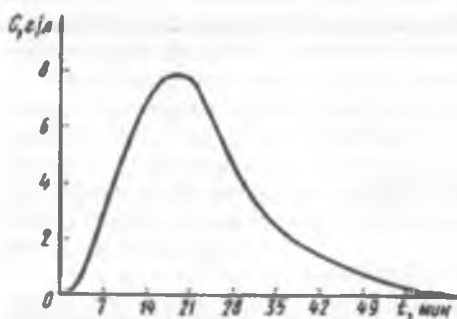


Рис. 5.5. С-кривая отклика системы

составляет $G_2 = 1000$ кг/ч;
ее теплоемкость $c_{p2} =$
 $= 2520$ Дж/(кг · К); плотность
 $\rho = 1200$ кг/м³. Обогрев осу-
ществляется насыщенным вода-
ным паром, имеющим темпера-
туру $T_1 = 120$ °С. Диаметр ци-
линдрической поверхности теп-
лообмена равен $D_T = 0,5$ м. Ко-
эффициент теплопередачи со-
ставляет $K = 600$ Вт/(м² · °К).
Длина теплообменника 1,5.

Для оценки структуры по-
тока нагреваемой в теплооб-

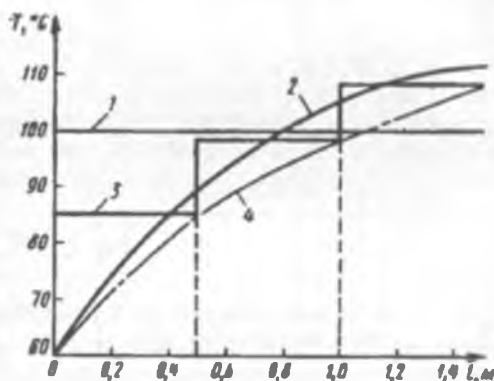


Рис. 5.6. Расчет температурного профиля по различным моделям: 1 — идеальное смешение; 2 — идеальное вытеснение; 3 — ячеечная модель; 4 — диффузионная модель

менюе жидкости экспериментально снималась С-кривая отклика системы (рис. 5.5), с помощью которой далее были рассчитаны параметры ячеечной и диффузионной модели: $n = 3$ и $D_l = 3.54 \cdot 10^{-4} \text{ м}^2/\text{с}$.

Затем по приведенным моделям рассчитывалось распределение температуры хладагента по длине теплообменника. Результаты представлены на рис. 5.6.

Они свидетельствуют о значительном разбросе температур, получаемом для различных моделей. Так, модель идеального вытеснения дает завышенные температуры ($T_{2к} = 112^\circ\text{C}$), а модель полного смешения — заниженные ($T_{2к} = 100^\circ\text{C}$). Более реальный характер изменения температуры по теплообменнику отражается ячеечной и диффузионной моделями ($T_{2к} = 107^\circ\text{C}$). При этом конечные температуры для данных моделей практически совпадают, но тем не менее профили температур различаются существенно. Различие конечных температур для модели идеального вытеснения и диффузионной модели составляет 5° (около 5%), что существенно при расчетах теплообменников. Еще большее различие дают модели вытеснения и полного смешения хладагента.

Приведенные результаты показывают, как важно учитывать отклонения реального потока теплоносителя от режимов полного вытеснения и смешения.

§ 5.3. Моделирование работы рекуперативных теплообменных аппаратов

Общие соотношения. Данный вид теплообменных аппаратов находит наибольшее распространение в химической промышленности; к ним в первую очередь относятся рекуперативные кожухотрубчатые теплообменники (рис. 5.7).

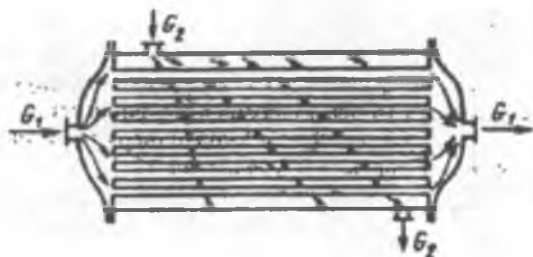


Рис. 5.7: Схема потоков теплоносителей в кожухотрубчатом теплообменнике

Расчет теплообменников обычно проводят с целью определения площади теплообменной поверхности F , необходимой для передачи нужного количества теплоты Q (проектный расчет), либо с целью определения температур теплоносителей и количества теплоты, которое передается в теплообменнике заданной конструкции и поверхности теплообмена (проверочный расчет). Принципиальных отличий в этих вариантах нет и поэтому в дальнейшем будем рассматривать проектный расчет.

Рассмотрим процесс теплопередачи между двумя теплоносителями с различной температурой, разделенными стенкой. Количество теплоты dQ , переносимое через элементарную площадь поверхности теплообмена df , составляет

$$dQ = K(T_1 - T_2) df. \quad (5.77)$$

Здесь T_1 и T_2 — температуры теплоносителей, усредненные в направлении, перпендикулярном теплообменной поверхности; K — коэффициент пропорциональности, имеющий смысл термической проводимости и равный количеству теплоты, передаваемому через единичную теплообменную поверхность в единицу времени при разности температур теплоносителей в 1° .

Термическая проводимость есть величина, обратная термическому сопротивлению, которое складывается из нескольких последовательно связанных термических сопротивлений по направлению потока теплоты, а именно: термического сопротивления переносу теплоты от основной массы первого теплоносителя к поверхности твердой стенки ($1/a_1$); сопротивления собственно твердой стенки ($\delta_{ст}/\lambda_{ст}$); сопротивления теплопереносу от поверхности стенки к основной массе второго теплоносителя ($1/a_2$). Термическим сопротивлением обладают дополнительно разного рода отложения из потоков теплоносителей на теплообменных поверхностях. Термические сопротивления таких дополнительных слоев выражаются через их толщины δ_i и коэффициенты теплопроводности λ_i .

Для плоских теплообменных поверхностей значение коэффициента теплопередачи выражается через частные термические сопротивления следующим образом:

$$K = \left(\frac{1}{\alpha_1} + \sum \frac{\delta_l}{\lambda_l} + \frac{1}{\alpha_2} \right)^{-1} \quad (5.78)$$

Рассмотрим теперь расчет теплообменника в случае постоянных значений кинетических и теплофизических коэффициентов.

Необходимая площадь теплообменной поверхности определяется интегрированием дифференциального уравнения (5.77) по всей искомой поверхности F :

$$F = \int_0^F \frac{dQ}{K(T_1 - T_2)} \quad (5.79)$$

Так как подынтегральная функция зависит от температур теплоносителей, а верхний предел интегрирования неизвестен, то при интегрировании уравнения (5.79) переходят к переменным температурам теплоносителей. Записывая уравнение теплового баланса для теплоносителей в пределах элементарной поверхности теплообмена df , получаем (для случая проточного теплообменника):

$$dQ = -c_1 G_1 dT_1 = -c_2 G_2 dT_2, \quad (5.80)$$

где c_1, c_2, G_1, G_2 — теплоемкости и массовые расходы первого и второго теплоносителей.

Соотношение (5.80) справедливо лишь тогда, когда можно пренебречь продольным переносом теплоты вследствие молекулярной теплопроводности и турбулентного переноса по сравнению с конвективным переносом. Из уравнения (5.80) имеем

$$d(T_1 - T_2) = -\left(\frac{1}{w_1} - \frac{1}{w_2} \right) K(T_1 - T_2) df, \quad (5.81)$$

где $w_1 = c_1 G_1$ и $w_2 = c_2 G_2$ — водные эквиваленты потоков теплоносителей.

При малом диапазоне изменения температур T_1 и T_2 величины c_1, c_2, K можно принять постоянными. Тогда интегрирование уравнения (5.81) приводит к экспоненциальному изменению разности температур теплоносителей вдоль теплообменной поверхности:

$$T_1 - T_2 = \Delta T_1 \exp \left[-K \left(\frac{1}{w_1} - \frac{1}{w_2} \right) f \right], \quad (5.82)$$

где ΔT_1 — разность температур теплоносителей при $f = 0$.

Из уравнения (5.82) средняя по поверхности разность температур ΔT_{cp} определяется как

$$\Delta T_{cp} = \frac{1}{F} \int_0^F \Delta T_1 \exp \left[-K \left(\frac{1}{w_1} - \frac{1}{w_2} \right) f \right] df = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln \frac{\Delta T_1}{\Delta T_2}} \quad (5.83)$$

Отметим, что ΔT_2 — разность температур теплоносителей на втором конце теплообменника при $f = F$.

Рассмотрим случай постоянных теплоемкостей и коэффициентов теплоотдачи. Интегрируя уравнение (5.77) при условии $K = \text{const}$, получаем

$$Q = \int_0^F K(T_1 - T_2) df = K \Delta T_{\text{ср}} F. \quad (5.84)$$

С учетом уравнения теплового баланса

$$W_1(T_{1\text{н}} - T_1) = W_2(T_{2\text{к}} - T_2) \quad (5.85)$$

нетрудно получить зависимость температуры теплоносителя для любого сечения теплообменника:

$$T_1 = T_{2\text{к}} + \frac{W_2}{W_1} \left\{ T_{1\text{н}} + \Delta T_1 \exp \left[-K \left(\frac{1}{W_1} - \frac{1}{W_2} \right) f \right] \right\}. \quad (5.86)$$

Аналогично находится распределение температуры второго теплоносителя. Температура наружных поверхностей стенки $T_{\text{с}}$ определяется из условия равенства количеств теплоты, передаваемых от горячего теплоносителя стенке и через всю систему термических сопротивлений:

$$\alpha_1(T_1 - T_{\text{с}1}) = K(T_1 - T_2). \quad (5.87)$$

Аналогично находится $T_{\text{с}2}$ в любом сечении теплообменника. Таким образом, в данном случае можно легко найти распределения всех температур внутри теплообменника.

Основным недостатком рассмотренного метода расчета теплообменника является отсутствие учета влияния на α_1 и α_2 температур стенок.

В практике расчета теплообменной аппаратуры значительное распространение получил метод, в котором теплоемкости теплоносителей и коэффициент теплопередачи полагают постоянными по всей теплообменной поверхности, однако в отличие от предыдущего метода значение коэффициента теплопередачи K здесь вычисляют в зависимости от усредненных по поверхности теплообмена значений $\bar{T}_1$, $\bar{T}_{\text{с}1}$, $\bar{T}_{\text{с}2}$, $\bar{T}_2$. Так как $\bar{T}_{\text{с}1}$ и $\bar{T}_{\text{с}2}$ не бывают заданы, а сами зависят от интенсивности установившегося теплообмена, то их итерационно уточняют. Алгоритм расчета по данному методу состоит в следующем.

По известным температурам теплоносителей на концах теплообменника вычисляют среднюю разность температур $\Delta T_{\text{ср}}$ (уравнение (5.83)). Для теплоносителя с большим водяным эквивалентом рассчитывают приближенное значение средней по длине аппарата температуры $\bar{T}_1 = 0,5(T_{1\text{н}} + T_{1\text{к}})$. Для второго теплоносителя среднюю температуру находят как $\bar{T}_2 = \bar{T}_1 - \Delta T_{\text{ср}}$.

Начальное приближение температуры стенки со стороны первого теплоносителя $\bar{T}_{\text{с}1}$ выбирают в диапазоне $\bar{T}_1 - \bar{T}_2$. Далее может быть оценен коэффициент теплоотдачи от первого теплоносителя к стенке α_1 . Тогда тепловой поток от первого теплоносителя к стенке q_1 составит

$$q_1 = \alpha_1(\bar{T}_1 - \bar{T}_{\text{с}1}). \quad (5.88)$$

По известному термическому сопротивлению загрязненной стенки

$(r_{\tau} + \frac{\delta_{\text{ст}}}{\lambda_{\text{ст}}})$ определяют температуру поверхности стенки со стороны второго теплоносителя, т.е.

$$\bar{T}_{c2} = \bar{T}_{c1} - q(r_{\tau} + \frac{\delta_{\text{ст}}}{\lambda_{\text{ст}}}). \quad (5.89)$$

Значение коэффициента теплоотдачи a_2 рассчитывают по известным T_{c2} и $\bar{T}_2$. Наконец, тепловой поток от стенки ко второму теплоносителю есть

$$q_2 = a_2(\bar{T}_{c2} - \bar{T}_2). \quad (5.90)$$

При стационарной теплопередаче тепловые потоки q_1 и q_2 должны быть равны друг другу. Очевидно, что на начальных итерациях это условие не выполняется, так как средние температуры заданы приближенно. В этом случае уточнение температуры стенки $\bar{T}_{c1}$ выполняют, исходя из следующего условия:

$$a_1(\bar{T}_1 - \bar{T}_{c1}) = q_2. \quad (5.91)$$

По достижении заданной точности расчета потоков q_1 и q_2 вычисляют значения площади поверхности теплообмена F и коэффициента теплопередачи K . Полученные значения F и K позволяют уточнить среднюю температуру первого теплоносителя $\bar{T}_1$ (на основании уравнения (5.86)). Далее определяют уточненное значение средней температуры второго теплоносителя $\bar{T}_2$ и итерационный процесс повторяют до тех пор, пока отличие средних температур теплоносителей на двух последовательных итерациях не окажется меньшим, чем заданная точность.

Отметим, что при расчете кипятильников либо конденсаторов, когда температура одного из теплоносителей постоянна, итерационный цикл по средней вдоль поверхности теплообмена температуре теплоносителя отсутствует, что вообще говоря, упрощает задачу. На рис. 5.8 приведена блок-схема алгоритма итерационного расчета теплообменника по осредненным вдоль поверхности теплообмена параметрам.

Рассмотрим теперь случай переменных теплоемкостей и коэффициентов теплоотдачи. В большинстве практических случаев теплоемкости и коэффициенты теплоотдачи существенно зависят от температур теплоносителей и поверхностей стенок. В связи с этим ранее рассмотренный алгоритм расчета теплообменников по осредненным параметрам теплообмена применим лишь в случаях небольших изменений температур теплоносителей. Указанное соображение учитывается в так называемом поинтервальном методе расчета теплообменной аппаратуры. Сущность метода сводится к следующему.

Имеющийся диапазон изменения температуры одного из теплоносителей $[T_{1\text{н}}, T_{1\text{к}}]$ разбивают на некоторое число интервалов, таких, что в пределах каждого интервала можно считать температуры теплоносителей и стенок неизменяемыми.

Пусть температура первого теплоносителя на конце первого из вы-

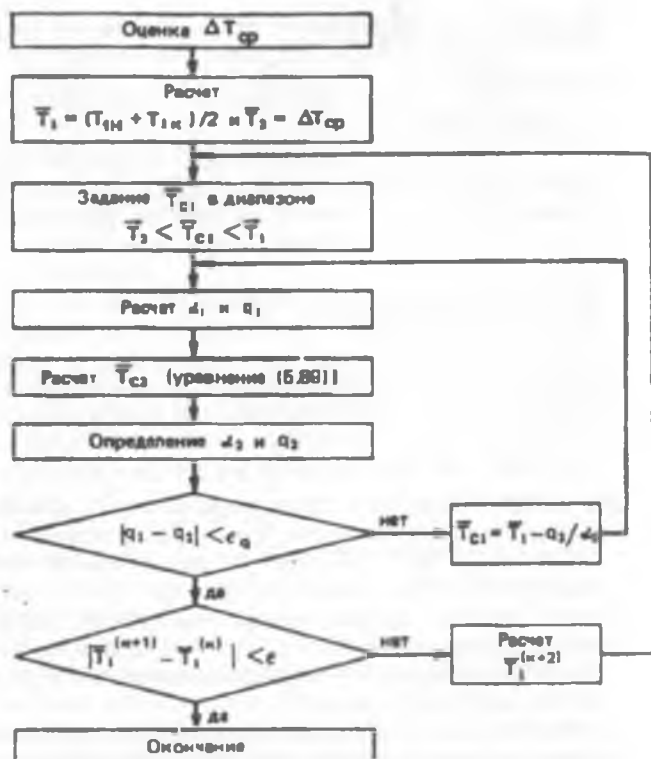


Рис. 5.8. Блок-схема алгоритма расчета теплообменника по осредненным вдоль поверхности параметрам теплообмена

бразных интервалов составляет T_1^1 . В пределах первого интервала температура этого теплоносителя согласно сделанным допущениям может быть принята постоянной и равной $\bar{T}_1^1 = 0,5(T_{1н} + T_1^1)$. Температуру второго теплоносителя на конце первого интервала (для примера рассматривается случай прямотока) легко определить из уравнения теплового баланса

$$T_2^1 = T_{2н} + \frac{c_1 G_1}{c_2 G_2} (T_{1н} - T_1^1). \quad (5.92)$$

и соответственно для второго теплоносителя температуру на первом участке можно принять равной

$$\bar{T}_2^1 = 0,5(T_{2н} + T_2^1). \quad (5.93)$$

Теперь к первому интервалу может быть применен алгоритм расчета теплообмена по осредненным параметрам, рассмотренный выше, т.е. в температурном интервале $T_1^1 + T_2^1$ выбирают начальное приближение температуры стенки $T_{с1}^1$ и итерационно рассчитывают значения $\alpha_1^1, q_1^1, T_{с2}^1, \alpha_2^1, q_2^1$.

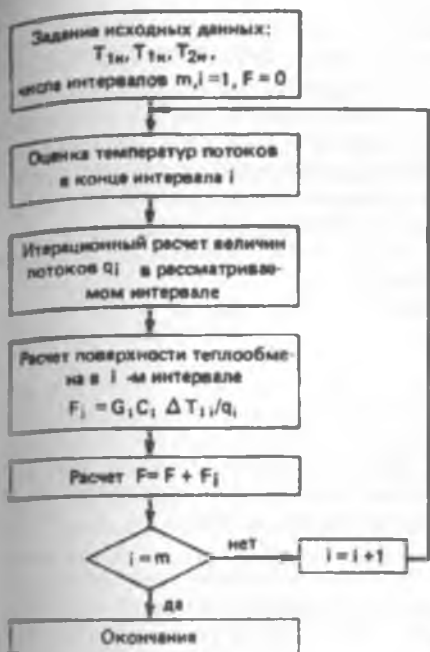


Рис. 5.9. Блок-схема алгоритма поинтервального расчета теплообменника

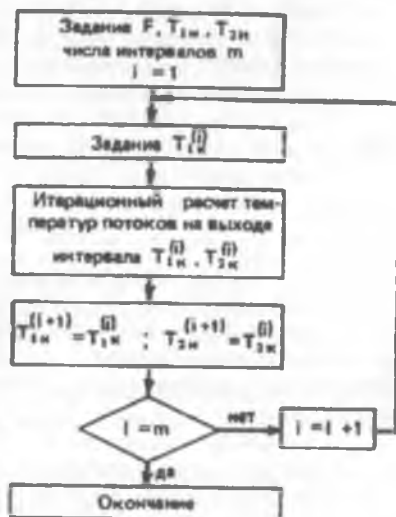


Рис. 5.10. Блок-схема алгоритма поинтервального расчета теплообменника в проверочной постановке

После достижения заданной точности расчета ($|q_1 - q_2| < \epsilon$) определяют площадь поверхности теплообмена, обеспечивающую передачу заданного количества теплоты.

Далее последовательно рассчитывают второй и последующие интервалы изменения температуры теплоносителя, вплоть до $T_{1к}$. Полученные для каждого интервала значения теплообменных поверхностей суммируют, что дает полную требуемую площадь поверхности теплообменника при заданных температурах теплоносителей на концах теплообменника. На рис. 5.9 приведена блок-схема поинтервального расчета теплообменника.

При проверочном расчете теплообменников с помощью алгоритма поинтервального расчета (известна поверхность теплообмена и требуется определить температуры теплоносителей на выходе) проводят итерационную разбивку поверхности теплообмена. Далее задают значения температуры одного из теплоносителей на выходе из интервала и итерационно уточняют температуры теплоносителей на выходе интервала, после чего переходят к следующему интервалу. Блок-схема алгоритма поинтервального расчета теплообменника в проверочной постановке приведена на рис. 5.10.

Расчет теплообменных аппаратов с изменением агрегатного состояния обоих теплоносителей. В рассматриваемых теплообменниках обычно происходит конденсация паров одного теплоносителя и кипение второго жидкого теплоносителя (например, кипятильники и ректификационные колонны, греющие камеры выпарных аппаратов). Основной особенностью данных процессов теплообмена является постоянство температур теплоносителей вдоль поверхности теплообмена и, как следствие этого, постоянство свойств теплоносителей и коэффициента теплопередачи.

Рассмотрим алгоритм расчета поверхности теплообмена в случае однофазовых кожухотрубных теплообменников.

Коэффициент теплоотдачи от стенки труб к кипящей в трубах жидкости $\alpha_{тр}$ определяется по формуле

$$\alpha_{тр} = 780 \frac{\lambda_{ж}^{1,3} \rho_{ж}^{0,5} \rho_{п}^{0,06} q^{0,6}}{\sigma_{ж}^{0,5} r_{ж}^{0,6} \rho_0^{0,66} c_{ж}^{0,3} \mu_{ж}^{0,3}} = Aq^{0,6}, \quad (5.94)$$

где q — удельный тепловой поток, Вт/м²; ρ_0 — плотность паров жидкости при атмосферном давлении; $r_{ж}$ — удельная теплота парообразования; $\sigma_{ж}$ — поверхностное натяжение; $c_{ж}$ — теплоемкость; $\mu_{ж}$ — вязкость; $\lambda_{ж}$ — теплопроводность.

Все величины в формуле (5.94) берутся при температуре кипения.

Коэффициент теплоотдачи от пара, конденсирующегося на наружной поверхности труб, может быть выражен в виде зависимости от удельной тепловой нагрузки:

$$\alpha_{м.тр} = 1,21 \lambda_{ж} \left(\frac{\rho_{ж} r_{ж}}{\mu_{ж} H q} \right)^{1/3} = Bq^{-1/3}, \quad (5.95)$$

где $r_{ж}$ — удельная теплота конденсации; $\lambda_{ж}$, $\rho_{ж}$, $\mu_{ж}$ — теплопроводность, плотность и вязкость конденсата соответственно; H — высота труб.

Для нахождения удельного теплового потока q , а затем поверхности теплопередачи

$$F = Q/q \quad (5.96)$$

воспользуемся основным уравнением теплопередачи

$$q = K \Delta T, \quad (5.97)$$

которое представим в виде

$$\frac{1}{K} = \frac{\Delta T}{q} = \frac{1}{\alpha_{тр}} + \Sigma \frac{\delta}{\lambda} + \frac{1}{\alpha_{м.тр}}, \quad (5.98)$$

где K — коэффициент теплопередачи; ΔT — разность температур теплоносителей; $\Sigma \frac{\delta}{\lambda} = \frac{\delta_{ст}}{\lambda_{ст}} + r_{31} + r_{32}$ — сумма термических сопротивлений стенки труб и загрязнений; Q — тепловая нагрузка, определяемая из теплового баланса аппарата.

После подстановки в уравнение (5.98) выражений (5.94) и (5.95) оно приводится к виду

$$f(q) = \frac{1}{A} q^{0.4} + \left(\Sigma \frac{\delta}{\lambda}\right) q + \frac{1}{B} q^{4/3} - \Delta T = 0. \quad (5.99)$$

Решение последнего уравнения относительно удельной тепловой нагрузки q можно провести методом половинного деления (рис. 5.11). Идея метода состоит в последовательном сужении отрезка $[a_i; b_i]$, на котором находится искомый корень q^* , с помощью деления этого отрезка пополам:

$$c_i = \frac{a_i + b_i}{2} \quad (5.100)$$

и проверки условия

$$f(a_i)f(c_i) < 0. \quad (5.101)$$

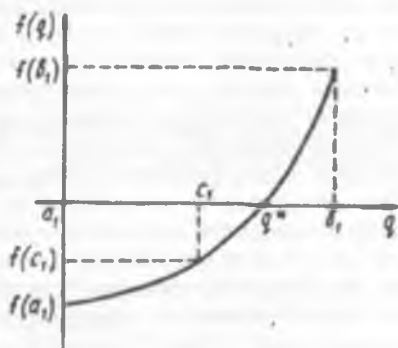
Если условие (5.101) выполняется, то выбирают отрезок $[a_i; c_i]$; в противном случае — отрезок $[c_i; b_i]$, и процедуру поиска повторяют. Деление отрезка производят до тех пор, пока его длина $b_i - a_i$ не станет меньше заданной точности.

Нижняя граница интервала поиска a_i принимается близкой к нулю, а верхняя b_i — равной критической удельной тепловой нагрузке $q_{кр}$ (уравнение (5.38)).

При найденной удельной тепловой нагрузке q требуемая поверхность теплообменника определяется из равенства (5.96).

В приложении 3 дана программа проектного расчета вертикальных кожухотрубных кипятильников BOILER.

Пример 1. Требуется рассчитать кипятильник ректификационной колонны. Кипятильник обогревается водяным паром; физические свойства конденсата при температуре конденсации: теплопроводность $\lambda_k = 0,683$ Вт/(м·К), плотность $\rho_k = 908$ кг/м³, удельная теплота испарения $r_k = 2\,095\,000$ Дж/кг, вязкость $\mu_k = 0,000177$ Па·с. Физические свойства кипящей жидкости при температуре кипения: теплопроводность $\lambda_{ж} = 0,686$ Вт/(м·К), плотность $\rho_{ж} = 957$ кг/м³, теплоемкость $c_{ж} = 4190$ Дж/(кг·К), вязкость $\mu_{ж} = 0,00024$ Па·с, поверхностное натяжение $\sigma_{ж} = 0,0583$ Н/м, плотность паров при температуре кипения $\rho_0 = 0,65$ кг/м³, удельная теплота испарения $r_{ж} = 2\,253\,900$ Дж/кг. Разность температур $\Delta T = 55,6$ °С, сумма термических сопротивлений стенки труб



и загрязнений $\Sigma \frac{\delta_i}{\lambda_i} = 0,0004787$ м² ×

× К/Вт, общая тепловая нагрузка $Q = 1\,005\,000$ Вт.

Рис. 5.11. Графическая иллюстрация метода половинного деления

Р е ш е н и е. Так как в качестве кипятильников ректификационных колонн обычно используют вертикальные одноходовые кожухотрубные теплообменники, а коэффициент теплоотдачи от греющего пара, конденсирующегося на наружной поверхности труб, зависит от их высоты, то первоначально зададим высоту труб $H = 2$ м. На основе исходных данных по программе BOILER рассчитываем требуемую поверхность теплообмена F . Результаты расчета следующие: $\alpha_{тр} = 10478,2 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К})$, $\alpha_{мтр} = 7073,0 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К})$, $K = 1395,9 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К})$, $F = 12,9 \text{ м}^2$.

Ближайший из ГОСТ 15122-79 одноходовой кожухотрубный теплообменник с высотой труб $H = 2$ м имеет поверхность 18 м^2 . Следовательно, запас поверхности теплообмена по сравнению с требуемой составит

$$\Delta = \frac{18 - 12,9}{12,9} \cdot 100 \% = 39,5 \%$$

Попытаемся более точно подобрать теплообменник из ГОСТа. Для этого примем высоту труб равной $H = 1,5$ м. Расчет теплообменника в этом случае дает: $\alpha_{тр} = 10596,5 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К})$, $\alpha_{мтр} = 7698,1 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К})$, $K = 1422,3 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К})$, $F = 12,7 \text{ м}^2$.

Соответствующий ближайший теплообменник из ГОСТ 15122-79 с поверхностью 14 м^2 обеспечивает запас по поверхности

$$\Delta = \frac{14 - 12,7}{12,7} \cdot 100 \% = 10,3 \%,$$

что является вполне удовлетворительным.

Таким образом, рассчитанный во втором случае кипятильник предпочтительнее, так как он обеспечивает более обоснованный запас по поверхности теплообмена и имеет меньшую поверхность теплообмена.

Расчет теплообменных аппаратов с изменением агрегатного состояния одного из теплоносителей. К данному классу теплообменников можно отнести конденсаторы паров жидкостей и подогреватели, в которых в качестве греющего агента используется конденсирующийся пар. В таких теплообменниках температура изменяющего агрегатное состояние теплоносителя остается постоянной вдоль поверхности теплопередачи и соответствует температуре фазового перехода, а температура второго теплоносителя монотонно изменяется. Следовательно, движущая сила теплопередачи и коэффициент теплопередачи изменяются вдоль поверхности. В этом случае расчет теплообменника ведут либо на основе осредненных вдоль поверхности параметров теплообмена, либо поинтервально, разбивая всю поверхность теплообмена на участки и предполагая на каждом из них постоянными параметры теплообмена. Далее будем рассматривать расчет теплообменника по осредненным вдоль всей поверхности параметрам. Предлагаемый алгоритм расчета будет относиться к одно- и многоходовым кожухотрубным теплообменникам, в которых в межтрубном пространстве конденсируются пары жидкостей, а в трубах вследствие теплоты конденсации происходит нагревание жидкостей или газов.

Коэффициент теплоотдачи к теплоносителю в трубах может быть представлен в виде

$$\alpha_{\text{тр}} = \frac{\lambda_{\text{тр}}}{d} x \text{Re}_{\text{тр}}^y \text{Pr}^{0.43} = CN^{-y}, \quad (5.102)$$

где

$$\text{Re}_{\text{тр}} = \frac{u_{\text{тр}} d \rho_{\text{тр}}}{\mu_{\text{тр}}} = \frac{4G_{\text{тр}} z}{\pi \mu_{\text{тр}} d N}; \quad \text{Pr}_{\text{тр}} = \frac{c_{\text{тр}} \mu_{\text{тр}}}{\lambda_{\text{тр}}};$$

$x = 0,023$, $y = 0,8$, если $\text{Re}_{\text{тр}} \geq 10^4$; $x = 0,008$, $y = 0,9$, если $2300 \leq \text{Re}_{\text{тр}} < 10^4$; $G_{\text{тр}}$ — массовый расход теплоносителя в трубах; $d = d_{\text{н}} - 2\delta_{\text{ст}}$ — внутренний диаметр труб; N — число труб; z — число ходов по трубному пространству.

Соответственно коэффициент теплоотдачи от пара, конденсирующегося на наружной поверхности вертикальных труб диаметром $d_{\text{н}}$ и высотой H , есть

$$\alpha_{\text{мтр}} = DN^{1/3}, \quad (5.103)$$

где

$$D = 3,78 \lambda_{\text{к}} \sqrt{\frac{\rho_{\text{к}}^2 d_{\text{н}}}{\mu_{\text{к}} G_{\text{п}}}}. \quad (5.104)$$

В случае горизонтальных труб имеем аналогичное соотношение

$$\alpha_{\text{мтр}} = DN^{1/3}, \quad (5.105)$$

но

$$D = 2,02 P \lambda_{\text{к}} \sqrt{\frac{\rho^2 L}{\mu_{\text{к}} G_{\text{п}}}}, \quad (5.106)$$

где L — длина труб; P — коэффициент, учитывающий число труб в вертикальном ряду в диаметральной сечении теплообменника.

Величина поверхности теплоотдачи F связана с числом труб N соотношением

$$F = \pi \left(\frac{d_{\text{н}} + d}{2} \right) HN. \quad (5.107)$$

Тогда задачу определения поверхности теплопередачи можно свести к задаче отыскания числа труб N заданной длины (высоты) и диаметра. Для этого используем уравнение теплопередачи

$$KF \Delta T_{\text{ср}} = G_{\text{п}} r_{\text{к}} \quad (5.108)$$

или

$$\frac{1}{K} = \frac{1}{\alpha_{\text{тр}}} + \sum \frac{\delta}{\lambda} + \frac{1}{\alpha_{\text{мтр}}} = \frac{\pi d_{\text{ср}} H N \Delta T_{\text{ср}}}{G_{\text{п}} r_{\text{к}}}. \quad (5.109)$$

Здесь $\Delta T_{\text{ср}}$ — среднелогарифмическая движущая сила; $G_{\text{п}} r_{\text{к}}$ — общая теп-

ловая нагрузка; $\Sigma \frac{\delta}{\lambda} = \frac{\delta_{ст}}{\lambda_{ст}} + r_{31} + r_{32}$ — сумма термических сопротивлений стенки труб и загрязнений.

После подстановки в уравнение (5.109) выражений (5.102) и (5.103) оно приводится к виду

$$f(N) = \frac{1}{D} N^{-4/3} \left(\Sigma \frac{\delta}{\lambda} \right) N^{-1} + \frac{1}{C} N^{(y-1)} - \frac{\pi d_{ср} H \Delta T_{ср}}{G_{п} r_k} = 0. \quad (5.110)$$

Последнее уравнение можно решить относительно числа труб в теплообменнике N методом половинного деления, сущность которого уже рассмотрена ранее (см. с. 207). После определения числа труб N необходимая поверхность теплообмена F определяется из уравнения (5.107).

Следует отметить, что для расчета поверхности теплопередачи по уравнению (5.107) необходимо предварительно задать ряд конструктивных параметров, а именно: тип теплообменника (горизонтальный, вертикальный), диаметр труб d_k , число ходов z и высоту (длину) труб H . На рис. 5.12 приведена блок-схема алгоритма расчета теплообменника, а в приложении 4 дана программа расчета COND.

В программе предусмотрен расчет $\alpha_{тр}$ по формуле для развитого турбулентного режима движения теплоносителя в трубах ($x = 0,023$, $y = 0,8$). Если в результате расчета числа труб выбранного диаметра и высоты получается, что безразмерное число Рейнольдса лежит в диапазоне $2300 < Re_{тр} < 10^4$, то производят коррекцию: $x = 0,008$, $y = 0,9$ и осуществляют пересчет необходимого для теплопередачи числа труб того же диаметра и высоты.

Программой не предусмотрен расчет $\alpha_{тр}$ для ламинарного режима, поэтому в процессе выбора конструктивных характеристик теплообменника (диаметра труб d_k , числа ходов z и высоты труб H) следует стремиться к тому, чтобы получаемое в результате расчета число труб N обеспечивало выполнение условия $Re_{тр} \geq 2300$.

Пример 2. Рассчитать кожухотрубный подогреватель исходной смеси ректификационной колонны. Обогрев ведется водяным паром. Физические свойства конденсата при температуре конденсации: теплопроводность

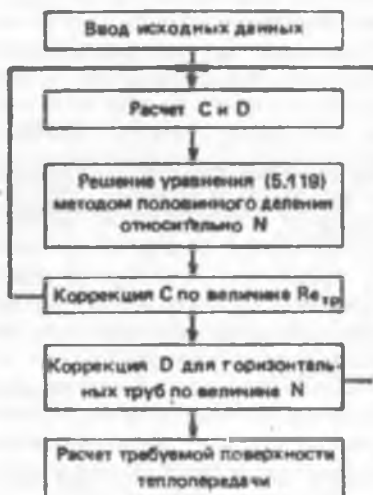


Рис. 5.12. Блок-схема алгоритма расчета кожухотрубного теплообменника с изменением агрегатного состояния одного из теплоносителей

$\lambda_k = 0,683 \text{ Вт/(м·К)}$, плотность $\rho_k = 908 \text{ кг/м}^3$, удельная теплота испарения $r_k = 2\,095\,000 \text{ Дж/кг}$, вязкость $\mu_k = 0,000177 \text{ Па·с}$, расход пара $G_n = 0,170 \text{ кг/с}$. Физические свойства жидкости при ее средней температуре в трубах: теплопроводность $\lambda_{тр} = 0,458 \text{ Вт/(м·К)}$, вязкость $\mu_{тр} = 0,000534 \text{ Па·с}$, теплоемкость $c_{тр} = 3730 \text{ Дж/(кг·К)}$. Суммарное термическое сопротивление стенки труб и загрязнений $\Sigma \frac{\delta}{\lambda} = 0,000479 \text{ м}^2 \cdot \text{К/Вт}$.

Средняя разность температур $\Delta T_{ср} = 106^\circ \text{С}$. Расход жидкости $G_{тр} = 0,973 \text{ кг/с}$.

Р е ш е н и е. Рассмотрим вариант горизонтального теплообменника ($T = 1$) с наружным диаметром труб $d_n = 0,02 \text{ м}$, числом ходов $z = 1$ и длиной труб $L = 3 \text{ м}$. После ввода исходных данных по программе COND получаем $a_{тр} = 865,1 \text{ Вт/(м}^2 \cdot \text{К)}$, $a_{мтр} = 13118,3 \text{ Вт/(м}^2 \cdot \text{К)}$, $K = 584,5 \text{ Вт/(м}^2 \cdot \text{К)}$, $Re_{тр} = 4674,4$, $N = 31$.

Соответствующий теплообменник из ГОСТа с указанными конструктивными характеристиками имеет число труб $N = 61$, т.е. запас поверхности по числу труб почти двукратный:

$$\Delta = \frac{61 - 31}{31} \cdot 100\% = 96,8\%.$$

Уменьшив длину труб теплообменника до 2 м, оставив остальные конструктивные характеристики без изменения. В результате расчета получаем $a_{тр} = 247,0 \text{ Вт/(м}^2 \cdot \text{К)}$, $a_{мтр} = 15625,8 \text{ Вт/(м}^2 \cdot \text{К)}$, $K = 217,2 \text{ Вт/(м}^2 \cdot \text{К)}$, $Re_{тр} = 1161,1$, $N = 124$.

Таким образом, уменьшение длины труб привело к увеличению их числа и снижению числа Re (а следовательно, и $a_{тр}$), которое оказалось менее 2300. Этот вариант не подходит.

Анализ результатов показывает, что целесообразно перейти к расчету двухходовых теплообменников, сохранив длину труб равной 2 м. Рассчитываем теплообменник с наружным диаметром труб $d_n = 0,025 \text{ м}$. Результаты расчета следующие: $a_{тр} = 740,9 \text{ Вт/(м}^2 \cdot \text{К)}$, $a_{мтр} = 12628,1 \text{ Вт/(м}^2 \cdot \text{К)}$, $K = 524,2 \text{ Вт/(м}^2 \cdot \text{К)}$, $Re_{тр} = 5323,3$, $N = 41$.

Соответствующий теплообменник из ГОСТа имеет число труб $N = 52$. Таким образом, запас по числу труб составляет

$$\Delta = \frac{52 - 41}{41} \cdot 100\% = 26,8\%.$$

Этот результат можно считать удовлетворительным. Выбранный горизонтальный теплообменник имеет диаметр кожуха $0,325 \text{ м}$, $d_n = 0,025 \text{ м}$, число ходов 2, число труб 52, длину труб 2 м и поверхность теплообмена 8 м^2 .

Расчет теплообменных аппаратов без изменения агрегатного состояния теплоносителей. Данная группа теплообменных аппаратов включает подогреватели и холодильники, в которых в процессе теплопередачи ни один из теплоносителей не изменяет агрегатного состояния.

В ходе нагрева и охлаждения теплоносителей температура каждого из них непрерывно и монотонно меняется вдоль теплообменной поверхности. Соответственно параметры теплопередачи (коэффициент теплопередачи, движущая сила) также будут изменяться. Будем рассматривать расчет теплообменных аппаратов на основе осредненных по всей теплопередающей поверхности коэффициентов теплопередачи и разности температур теплоносителей. При этом свойства теплоносителей берутся при средних температурах.

Рассматриваемый далее алгоритм расчета относится к одно- и многоходовым кожухотрубным теплообменникам со смешанным и противоточным движением теплоносителей.

Так как теплоносители в ходе теплообмена не испытывают фазовых превращений, то процесс теплоотдачи от горячего теплоносителя к стенке и от стенки к холодному теплоносителю зависит от режима течения теплоносителя, определяемого безразмерным числом Рейнольдса, свойств теплоносителя, определяемых безразмерным числом Прандтля, и температуры стенки.

Коэффициент теплоотдачи для теплоносителя, движущегося в межтрубном пространстве $\alpha_{\text{мтр}}$ теплообменников с сегментными перегородками, определяется следующими выражениями:

$$\alpha_{\text{мтр}} = \frac{\lambda_{\text{мтр}}}{d_3} \epsilon_{\varphi} 0,4 \text{Re}_{\text{мтр}}^{0,6} \text{Pr}_{\text{мтр}}^{0,36}, \text{ если } \text{Re}_{\text{мтр}} > 1000; \quad (5.111)$$

$$\alpha_{\text{мтр}} = \frac{\lambda_{\text{мтр}}}{d_3} \epsilon_{\varphi} 0,56 \text{Re}_{\text{мтр}}^{0,5} \text{Pr}_{\text{мтр}}^{0,36}, \text{ если } \text{Re}_{\text{мтр}} \leq 1000. \quad (5.112)$$

Здесь $\text{Re}_{\text{мтр}} = \frac{G_{\text{мтр}} d_3}{\mu_{\text{мтр}} S_{\text{мтр}}}$; $\text{Pr}_{\text{мтр}} = \frac{c_{\text{мтр}} \mu_{\text{мтр}}}{\lambda_{\text{мтр}}}$ — безразмерные числа

Рейнольдса и Прандтля для теплоносителя в межтрубном пространстве; $\epsilon_{\varphi} = 0,6$ — коэффициент, учитывающий влияние угла атаки при обтекании потоком пучка труб; $S_{\text{мтр}}$ — площадь наиболее узкого сечения потока в межтрубном пространстве теплообменника с сегментными перегородками, которая определяется из нормалей. Приближенно ее можно определить по формулам

$$S_{\text{мтр}} \approx 0,3S, \text{ если } D \leq 0,3 \text{ м};$$

$$S_{\text{мтр}} \approx 0,16S, \text{ если } D > 0,3 \text{ м},$$

где $S = \frac{\pi D^2}{4}$ — площадь сечения теплообменника; D — диаметр кожуха.

В качестве определяющего размера в уравнениях (5.111), (5.112) принимают эквивалентный диаметр d_3 .

Коэффициент теплоотдачи для теплоносителя, движущегося в трубах, находят по формулам:

$$\alpha_{\text{тр}} = 0,023 \frac{\lambda_{\text{тр}}}{d} \text{Re}_{\text{тр}}^{0,8} \text{Pr}_{\text{тр}}^{0,43}, \text{ если } \text{Re}_{\text{тр}} > 10^4; \quad (5.113)$$

$$\alpha_{\text{тр}} = 0,008 \frac{\lambda_{\text{тр}}}{d} \text{Re}_{\text{тр}}^{0,9} \text{Pr}_{\text{тр}}^{0,43}, \text{ если } 2300 < \text{Re}_{\text{тр}} < 10^4; \quad (5.114)$$

$$\alpha_{\text{тр}} = 0,15 \frac{\lambda_{\text{тр}}}{d} \text{Re}_{\text{тр}}^{0,33} \text{Pr}_{\text{тр}}^{0,43} \text{Gr}_{\text{тр}}^{0,1}, \text{ если } \text{Re}_{\text{тр}} < 2300. \quad (5.115)$$

Здесь

$$\text{Re}_{\text{тр}} = \frac{4G_{\text{тр}}z}{\pi\mu_{\text{тр}}dN}; \quad \text{Pr}_{\text{тр}} = \frac{c_{\text{тр}}\mu_{\text{тр}}}{\lambda_{\text{тр}}}; \quad \text{Gr}_{\text{тр}} = \frac{gd^3\beta_{\text{тр}}\rho_{\text{тр}}^2}{\mu_{\text{тр}}^2}\Delta T$$

– безразмерные числа Рейнольдса, Прандтля и Грасгофа для теплоносителя в трубах; $\beta_{\text{тр}}$ – коэффициент объемного расширения; z – число ходов по трубному пространству. В качестве определяющего размера в уравнениях (5.113)–(5.115) принят внутренний диаметр труб $d = d_{\text{н}} - 2\delta_{\text{ст}}$.

Отметим, что коэффициент теплоотдачи для теплоносителя в трубах $\alpha_{\text{тр}}$ зависит от разности температур внутренней поверхности труб и теплоносителя в трубах ΔT , которая заранее неизвестна. Поэтому величину ΔT итерационно уточняют, используя условие стационарности теплопередачи в теплообменнике:

$$\alpha_{\text{тр}}\Delta T = K\Delta T_{\text{ср}} \quad (5.116)$$

или

$$\Delta T = \frac{K\Delta T_{\text{ср}}}{\alpha_{\text{тр}}}. \quad (5.117)$$

Среднюю разность температур $\Delta T_{\text{ср}}$ определяют в зависимости от схемы движения теплоносителей по формуле

$$\Delta T_{\text{ср}} = \epsilon_{\Delta T} \Delta T_{\text{ср.лог}}, \quad (5.118)$$

где $\Delta T_{\text{ср.лог}}$ – среднелогарифмическая разность температур; $\epsilon_{\Delta T} < 1$ – коэффициент, учитывающий снижение средней движущей силы при смешанном токе ($z = 2, 4, 6$) по сравнению с противотоком ($\epsilon_{\Delta T} = 1$ при $z = 1$).

После определения коэффициента теплопередачи K и средней движущей силы $\Delta T_{\text{ср}}$ поверхность теплопередачи рассчитывают при известной общей тепловой нагрузке Q из уравнения теплопередачи

$$F = \frac{Q}{K\Delta T_{\text{ср}}}. \quad (5.119)$$

Так как процесс теплопередачи зависит и от конструктивных характеристик теплообменника, то перед началом расчета необходимо задать следующие конструктивные параметры: наружный диаметр труб $d_{\text{н}}$, число ходов z , коэффициент $\epsilon_{\Delta T}$, число труб в пучке N и площадь наиболее узкого сечения межтрубного пространства $S_{\text{мтр}}$.

На рис. 5.13 приведена блок-схема алгоритма расчета теплообменника

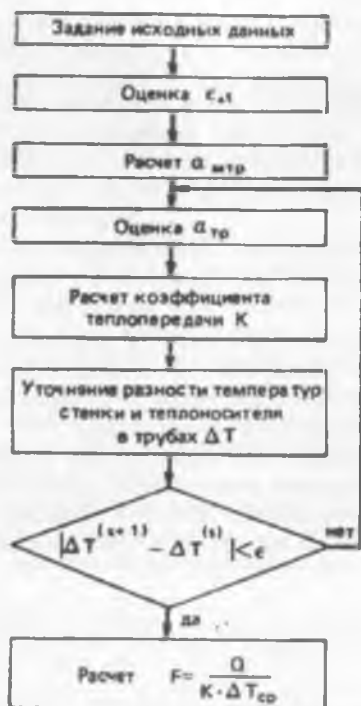


Рис. 5.13. Блок-схема алгоритма расчета теплообменника в отсутствие фазовых переходов теплоносителей

для рассматриваемого случая. Соответствующая программа расчета COOLER дана в приложении 5.

Пример 3. Рассчитать холодильник кубового остатка ректификационной колонны. Общая тепловая нагрузка $Q = 402\,980$ Вт. Расход кубового остатка, движущегося по трубам, равен $G_{\text{тр}} = 1,24$ кг/с, его теплопроводность $\lambda_{\text{тр}} = 0,662$ Вт/(м·К), плотность $\rho_{\text{тр}} = 986$ кг/м³, вязкость $\mu_{\text{тр}} = 0,00054$ Па·с, теплоемкость $c_{\text{тр}} = 4190$ Дж/(кг·К), коэффициент объемного расширения $\beta_{\text{тр}} = 0,00048$ К⁻¹. Охлаждающая вода движется по межтрубному пространству с расходом $G_{\text{мтр}} = 4,36$ кг/с и имеет при своей средней температуре теплопроводность $\lambda_{\text{мтр}} = 0,61$ Вт/(м·К), вязкость $\mu_{\text{мтр}} = 0,00085$ Па·с, теплоемкость $c_{\text{мтр}} = 4190$ Дж/(кг·К). Среднелогарифмическая разность температур теплоносителей равна $\Delta T_{\text{ср.лог}} = 25,4$ °С. Сумма термических сопротивлений стенок труб и загрязнений $\Sigma \delta/\lambda = 0,00042$ м²·К/Вт.

Решение. Выберем два варианта кожухотрубного холодильника. Первый вариант: $d_n = 0,020$ м, $z = 2$, $N = 166$ и на тот случай, если не хватит максимально возможной длины труб (6 м) для этого диаметра кожуха (0,4 м), увеличим последний до 600 мм. Второй вариант: $d_n = 0,020$ м, $z = 2$, $N = 374$. Для рассматриваемых вариантов теплообменника $\epsilon_{\Delta T} =$

$= 0,9$. По нормальям определяем $S_{\text{мтр}} = 0,021 \text{ м}^2$ для первого варианта и $S_{\text{мтр}} = 0,047 \text{ м}^2$ для второго.

После ввода исходной информации по программе COOLER в случае первого варианта получаем: $\alpha_{\text{тр}} = 531,9 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К})$, $\alpha_{\text{мтр}} = 2257,9 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К})$, $K = 364,6 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К})$, $F = 48,3 \text{ м}^2$, $Re_{\text{тр}} = 2205,1$, $Re_{\text{мтр}} = 4885,1$.

По нормальям подходит теплообменник с длиной труб 6 м и поверхностью $F = 62 \text{ м}^2$. Запас поверхности составляет

$$\Delta = \frac{62 - 48,3}{48,3} \cdot 100\% = 28,4\%.$$

Второй вариант: $\alpha_{\text{тр}} = 406,7 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К})$, $\alpha_{\text{мтр}} = 1392,4 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К})$, $K = 278,0 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К})$, $F = 63,4 \text{ м}^2$, $Re_{\text{тр}} = 978,7$, $Re_{\text{мтр}} = 2182,7$.

Этот теплообменник вследствие большего проходного сечения для обоих потоков, меньших значений чисел Рейнольдса, меньших значений коэффициентов теплоотдачи и теплопередачи имеет большую поверхность, однако его достоинством является меньшее гидравлическое сопротивление и меньшая необходимая длина труб: $L = 3 \text{ м}$ при диаметре кожуха 0,6 м. Запас поверхности составляет

$$\Delta = \frac{70 - 63,4}{63,4} \cdot 100\% = 10,4\%.$$

Для того чтобы снизить требуемую поверхность, а вместе с ней и длину труб, рассмотрим еще два варианта с увеличенным при прочих равных условиях числом ходов по трубному пространству до $z = 4$ ($N = 338$, $S_{\text{мтр}} = 0,047$) и $z = 6$ ($N = 320$, $S_{\text{мтр}} = 0,047$).

В результате расчета теплообменника с числом ходов $z = 4$ получаем $\alpha_{\text{тр}} = 524,0 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К})$, $\alpha_{\text{мтр}} = 1392,4 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К})$, $K = 328,2 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К})$, $F = 53,7 \text{ м}^2$, $Re_{\text{тр}} = 2166,0$, $Re_{\text{мтр}} = 2182,7$.

Запас поверхности составляет

$$\Delta = \frac{64 - 53,7}{53,7} \cdot 100\% = 19,2\%.$$

Этот вариант теплообменника, длина которого также равна 3 м, имеет небольшое преимущество перед вторым вариантом благодаря увеличению коэффициента теплопередачи и соответствующего снижения требуемой поверхности теплопередачи.

Результаты расчета четвертого варианта ($z = 6$) таковы: $\alpha_{\text{тр}} = 853,7 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К})$, $\alpha_{\text{мтр}} = 1392,4 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К})$, $K = 432,9 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К})$, $F = 40,7 \text{ м}^2$, $Re_{\text{тр}} = 3431,7$, $Re_{\text{мтр}} = 2182,7$.

Достоинство этого варианта теплообменника в том, что он имеет меньшую длину труб $L = 2 \text{ м}$ при том же диаметре кожуха $D = 0,6 \text{ м}$. Запас поверхности есть

$$\Delta = \frac{41 - 40,7}{40,7} \cdot 100\% = 0,7\%.$$

Однако у рассматриваемого варианта теплообменника большее гидравлическое сопротивление, чем у второго варианта.

Таким образом, можно считать приемлемым два варианта: второй и четвертый. Выбор из них может быть сделан после гидравлического расчета на основе экономического критерия.

§ 5.4. Постановка задач оптимизации теплообменных аппаратов

Рассмотренные алгоритмы расчета теплообменников ни в коей мере не гарантируют получение оптимального проектного варианта. Рассчитанная величина требуемой теплообменной поверхности может быть реализована различными способами конструктивного оформления теплообменной аппаратуры. Можно варьировать число и диаметр труб, диаметр кожуха, число ходов и количество перегородок в межтрубном пространстве, линейные скорости теплоносителей, а в некоторых случаях и конечную температуру одного из теплоносителей.

Различные варианты оформления теплообмена обычно оказываются неравноценными по многим показателям, что требует проведения оптимизации решения по выбранному критерию. Наиболее общим и полным критерием является критерий приведенных затрат Пр.З.:

$$\text{Пр.З.} = \frac{KЗ}{T_n} + 3З, \quad (5.120)$$

где $KЗ$ — капитальные затраты; T_n — нормативный срок окупаемости капитальных затрат; $3З$ — эксплуатационные затраты при работе теплообменника в течение одного года.

При расчете критерия оптимальности его необходимо выразить через конструктивные и технологические параметры и переменные, влияющие на работу теплообменника. Общие капитальные затраты $KЗ$ состоят из затрат на теплообменник (K_T) и нагнетательные устройства K_n (насос, вентилятор, газодувка), которые должны обеспечить прохождение теплоносителей через аппарат, затрат на монтаж теплообменника $K_{Т.м}$ и нагнетательных устройств $K_{н.м}$. Обычно считают, что капитальные и монтажные затраты тем значительнее, чем больше величина поверхности теплообмена F : $K_T = k_T F$, $K_{Т.м} = k_{Т.м} F$, где k_T и $k_{Т.м}$ — цены изготовления и монтажа, отнесенные к единице поверхности теплообменника. Аналогично принимают, что $K_n = k_n N$, $K_{н.м} = k_{н.м} N$, где k_n и $k_{н.м}$ — затраты на стоимость и монтаж напорных устройств, приходящиеся на единицу мощности электродвигателя; N — мощность, затрачиваемая на перекачивание теплоносителей через теплообменник.

Эксплуатационные затраты $3З$ состоят, во-первых, из отчислений на капитальные вложения и расходов на текущий ремонт и содержание оборудования, принимаемых пропорциональными капитальным затратам: $k_{2,Т} K_T + k_{2,н} K_n$, где $k_{2,Т}$ и $k_{2,н}$ — коэффициенты, учитывающие амортизационные отчисления и расходы на текущий ремонт и содержание теплообменника и нагнетательных устройств.

Вторая группа эксплуатационных расходов не зависит от капитальных затрат, а пропорциональна времени работы теплообменника: $\mathcal{E}_N = N \cdot \Pi_0 \tau_r$, где Π_0 — цена за 1 кВт·ч электроэнергии; τ_r — число часов работы за год; $M_1 \Pi_1 + M_2 \Pi_2$ — цена за теплоносители и Π_n — годовая заработная плата персонала. Часто Π_n не зависит от параметров теплообменника и тогда в качестве постоянного слагаемого она не влияет на поиск оптимума. Кроме того, во многих случаях стоимость одного из теплоносителей не учитывается, так как он является технологическим продуктом, а оплачивается лишь стоимость второго теплоносителя (например, охлаждающей воды).

Подстановка всех составляющих в критерий оптимизации дает следующее его общее выражение:

$$\text{Пр.З} = \frac{1}{T_n} [(k_T + k_{T,M})F + (k_n + k_{n,M})N_{T,C}] + k_{2,T} k_T F + k_{2,n} k_n N + \Pi_0 N \tau_r + (M_1 \Pi_1 + M_2 \Pi_2) \tau_r. \quad (S.121)$$

Величина N непосредственно зависит от скорости теплоносителей, конструктивных размеров теплообменника, свойств теплоносителей. Коэффициенты T_n , k_T , $k_{T,M}$, k_n , $k_{n,M}$, $k_{2,T}$, $k_{2,n}$, Π_0 , τ_r , Π_1 , Π_2 , как правило, для конкретных задач известны. Отметим, что некоторые из варьируемых переменных имеют непрерывный характер изменения, в то время как другие изменяются дискретно (например, число ходов), что, вообще говоря, усложняет решение задачи оптимизации.

Рассмотрим теперь алгоритм расчета оптимального теплообменника по критерию приведенных затрат. Для заданной конструкции аппарата выделяют независимые переменные, оптимальные значения которых должны быть найдены (например, температура одного из теплоносителей на выходе из теплообменника, диаметр труб).

Через независимые переменные выражают следующие величины: поверхность теплообмена, гидравлическое сопротивление, массу аппарата, требуемую мощность нагревательного оборудования. Подстановка указанных величин в критерий оптимизации дает зависимость приведенных затрат от оптимизируемых переменных. Далее ищут минимум критерия и определяют значения искоемых переменных.

Пусть задана масса охлаждаемого теплоносителя G_1 , его температура на входе $T_{1н}$ и выходе $T_{1к}$, а также температура охлаждающегося теплоносителя на входе $T_{2н}$.

Из условий теплового баланса определяем зависимость расхода хладагента от температуры на выходе $T_{2к}$.

$$G_2 = \frac{G_1 c_1 (T_{1н} - T_{1к})}{c_2 (T_{2к} - T_{2н})}. \quad (S.122)$$

Теперь, задавая ряд допустимых температур хладагента на выходе из теплообменника $T_{2к}^{(i)}$, можно по одной из рассмотренных методик рассчитать соответствующие значения площади поверхности теплообмена $F^{(i)}$.

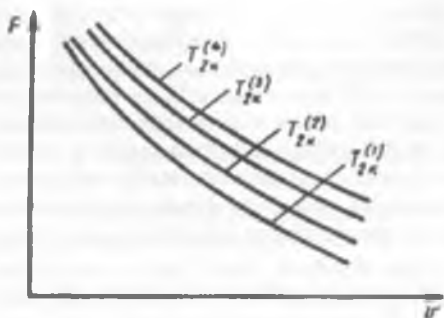


Рис. 5.14. Зависимость требуемой площади поверхности теплообмена F от конечной температуры хладагента T_{2k} и скорости движения теплоносителя v

При этом коэффициент теплопередачи будет зависеть от скорости движения теплоносителя $K = K(v)$. Поэтому для каждого значения температуры хладагента на выходе из теплообменника $T_{2k}^{(i)}$ определяем необходимую поверхность теплообмена при различных скоростях теплоносителя в трубах ($v = 0,4 \div 2,5$ м/с). На основании расчета получаем зависимость $F = F(T_{2k}, v)$ (рис. 5.14).

С другой стороны, поверхность теплообмена в кожухотрубчатом теплообменнике есть

$$F = nN\pi dl, \quad (5.123)$$

где n — число ходов пучка труб; N — число труб в пучке; d — диаметр труб; l — длина труб (один ход).

Согласно уравнению материального баланса число труб в пучке (N) определяется массовым расходом холодного теплоносителя и его скоростью в виде

$$N = \frac{G_2}{v(\pi d^2/4) \rho_2}, \quad (5.124)$$

где ρ — плотность.

Подставляя выражение (5.124) в (5.123), получаем

$$F = n \frac{G_2}{\rho_2 \frac{\pi d^2}{4} v} \pi dl = \frac{4n l G_2}{\rho_2 d v}, \quad (5.125)$$

Расход хладагента G_2 определяется его температурой на выходе T_{2k} . Кроме того, при постоянном диаметре и длине труб для различного числа ходов пучка труб $n = 2, 4, 6, 8, \dots$ получают зависимость поверхности F от скорости хладагента (уравнение (5.125)). Тогда, задавая различную температуру хладагента на выходе T_{2k} , т.е. различные расходы хладагента, получают зависимость $F = F(n, v)$ (рис. 5.15).

Очевидно, что искомое решение должно одновременно удовлетворять как уравнению теплового баланса (5.122), так и уравнению массового расхода хладагента (5.124). Графически это означает, что искомое решение соответствует точкам пересечения кривых $F(T_{2k}, v)$ и $F(n, v)$ при совмещении графиков на рис. 5.14 и 5.15. Найденным точкам пересечения кривых отвечают требуемые значения поверхности теплообмена F и скорости хладагента v при различных температурах хладагента на выходе и разном числе ходов пучка труб.

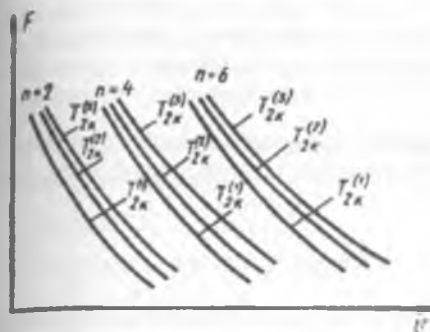
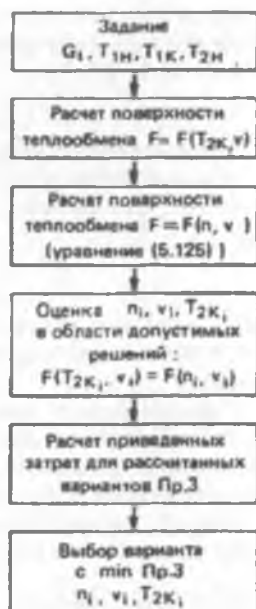


Рис. 5.15. Зависимость требуемой площади поверхности теплообмена от числа ходов n и скорости движения хладагента v

Рис. 5.16. Блок-схема алгоритма расчета оптимальной конструкции теплообменника



Теперь среди возможных решений необходимо выбрать оптимальное, соответствующее минимуму приведенных затрат. Для этого для каждого допустимого решения рассчитывают капитальные и эксплуатационные затраты (уравнение (5.121)) и выбирают такую конструкцию, т.е. поверхность теплообмена, число труб в пучке, число ходов, расход хладагента, которая обеспечивает минимум приведенных затрат. На рис. 5.16 изображена блок-схема алгоритма расчета оптимальной конструкции теплообменника.

§ 5.5. Диалоговая система оптимизации теплообменника типа "труба в трубе"

Оптимизация теплообменника "труба в трубе" подразумевает поиск минимума целевой функции (5.120) с помощью варьирования площадей проходных сечений для теплоносителей в теплообменнике. Отыскание оптимального варианта осуществляют путем экспериментирования с математической моделью теплообменника. Многовариантные расчеты теплообменного аппарата ведутся в диалоговом режиме с использованием видеотерминала, когда исследователь может сам целенаправленно изменять ход поиска.

Целевая функция (приведенные затраты) включает две основные статьи затрат: капитальные затраты на теплообменник, определяемые величиной поверхности теплообмена, и эксплуатационные затраты, определяемые требуемой мощностью на перекачку теплоносителей через теплообменник.

Величину капитальных затрат находят исходя из стоимости единицы площади теплообменной поверхности k_t и требуемой поверхности теплообмена F по формуле

$$K_t = k_t F. \quad (5.126)$$

Расчет эксплуатационных затрат подразумевает предварительное определение мощностей насосов N для прокачки теплоносителей через теплообменный аппарат, а именно:

$$N = \frac{G \Delta P}{\rho}, \quad (5.127)$$

где G — массовый расход теплоносителя; ρ — плотность теплоносителя; ΔP — полное сопротивление при движении теплоносителя через теплообменник.

В зависимости от природы возникновения движения различают сопротивления трения, которые обусловлены вязкостью жидкости, и местные сопротивления. Последние обуславливаются различными местными препятствиями движению потока (сужения, расширения, повороты и др.).

Полный перепад давления, необходимый при движении жидкости или газа через теплообменник ΔP , определяется выражением

$$\Delta P = \Delta P_T + \Sigma \Delta P_{мс}. \quad (5.128)$$

Здесь ΔP_T — сопротивление трения при движении теплоносителя; $\Delta P_{мс}$ — потери давления в местных сопротивлениях.

Так как природа возникновения составляющих сопротивлений в уравнении (5.128) различна, то и расчет их ведут раздельно.

Потери давления на преодоление сил трения при течении несжимаемой жидкости в каналах в общем случае рассчитывают по формуле

$$\Delta P_T = \xi \frac{l}{d} \frac{\rho u^2}{2}, \quad (5.129)$$

где l — полная длина канала; d — гидравлический диаметр, который в общем случае ищется как $d = \frac{4f}{\Pi}$ (f — поперечное сечение канала, Π — периметр); ρ — плотность теплоносителя; u — скорость теплоносителя; ξ — коэффициент сопротивления трению, зависящий от режима движения.

Значения местных сопротивлений при движении теплоносителя определяются выражением

$$\Delta P_{мс} = \xi \frac{\rho u^2}{2}, \quad (5.130)$$

где ξ — коэффициент местного сопротивления, зависящий от характера препятствия.

Рассмотрим математическую модель теплообменника "труба в трубе". Будем предполагать, что теплоносители в теплообменнике движутся в режиме противотока и их движение не сопровождается фазовыми переходами.

Кроме того, структура потоков теплоносителей соответствует идеальному смешению, а свойства берутся при средних температурах теплоносителей. При сделанных допущениях модель включает:

$$Q = G_1 c_{p1} (T_{1\kappa} - T_{1\kappa}) = G_2 c_{p2} (T_{2\kappa} - T_{2\pi}), \quad (5.131)$$

уравнение теплопередачи

$$Q = K \Delta T_{\text{ср}} F, \quad (5.132)$$

уравнение затрат мощности на прокачку

$$P = \left(\xi_1 \frac{l}{d_1} \frac{\rho_1 u_1^3}{2} \right) \frac{G_1}{\rho_1} + \left(\xi_2 \frac{l}{d_{2\text{экв}}} \frac{\rho_2 u_2^3}{2} \right) \frac{G_2}{\rho_2}, \quad (5.133)$$

где

$$K = \frac{1}{\frac{1}{a_1} + \frac{\delta}{\lambda} + \frac{1}{a_2}}, \quad (5.134)$$

$$\Delta T_{\text{ср}} = \frac{\Delta T_{\text{б}} - \Delta T_{\text{м}}}{\ln \frac{\Delta T_{\text{б}}}{\Delta T_{\text{м}}}}, \quad (5.135)$$

l — длина теплообменника; G_1, G_2 — расходы теплоносителей; δ — толщина стенки внутренней трубы; ρ_1, ρ_2 — плотности теплоносителей; c_{p1}, c_{p2} — удельные теплоемкости теплоносителей; u_1, u_2 — скорости движения теплоносителей по внутренней трубе и в кольцевом пространстве соответственно; $d_1, d_{2\text{экв}}$ — диаметр внутренней трубы и эквивалентный диаметр кольцевого канала (рис. 5.17).

Поверхность теплообмена F определяется из соотношения

$$F = \pi d_p l, \quad (5.136)$$

а для тонкой цилиндрической стенки расчетное значение диаметра поверхности теплопередачи составляет

$$d_p = d_1 + 2\delta \left(1 + \frac{a_2}{a_1} \right), \quad (5.137)$$

что соответствует следующему правилу: если $a_1 < a_2$, то $d_p = d_1$; если $a_2 < a_1$, то $d_p = d_2$; если $a_1 \approx a_2$, то $d_p = (d_1 + d_2)/2$.

Варируемым геометрическим характеристиками теплообменника "труба в трубе" являются внутренний диаметр

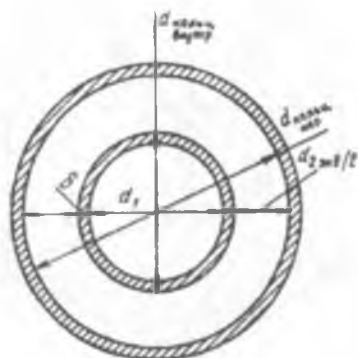


Рис. 5.17. Поперечное сечение теплообменника

внутренней трубы и эквивалентный диаметр кольцевого канала. Последствия вычисляются по формуле

$$d_{2экв} = \frac{4 (\text{поперечное сечение кольцевого канала})}{(\text{смоченный периметр})} = d_{\text{кольц. нар}} - d_{\text{кольц. внутр.}} \quad (5.138)$$

Скорости течения теплоносителей определяются из уравнений расхода:

$$G_1 = \rho_1 u_1 \frac{\pi d_1^2}{4}, \quad (5.139)$$

$$G_2 = \rho_2 u_2 \frac{\pi (d_{\text{кольц. нар}}^2 - d_{\text{кольц. внутр.}}^2)}{4}. \quad (5.140)$$

Коэффициенты сопротивления трения в трубе и кольцевом канале рассчитывают по следующим формулам:

для турбулентного режима ($Re > 10\,000$):

$$\xi_t = \frac{0.316}{Re^{0.25}}, \quad (5.141)$$

для ламинарного режима ($Re < 2300$):

$$\xi_n = \frac{64}{Re} \quad (\text{круглая труба}), \quad (5.142)$$

$$\xi_n = \frac{96}{Re} \quad (\text{кольцевой канал}), \quad (5.143)$$

для переходного режима ($2300 < Re < 10\,000$):

$$\frac{\xi}{\xi_t} = \gamma + \frac{\xi_n}{\xi_t} (1 - \gamma), \quad (5.144)$$

где коэффициент перемежаемости γ определяется так:

$$\gamma = 1 - \exp\left(1 - \frac{Re}{2300}\right). \quad (5.145)$$

Расчет единичного варианта для выбранных значений d_1 и $d_{2экв}$ проводится, как показано на функциональной схеме (рис. 5.18).

В заключение остановимся на поиске оптимального варианта конструкции теплообменника. В рассматриваемой задаче варьируют два параметра d_1 и $d_{2экв}$ (в программе — переменные $D1$ и $D2$). Соответственно поиск оптимума ведут по двум переменным. Одним из простейших методов многомерной оптимизации является метод покоординатного спуска. Его идея заключается в последовательном применении одномерного поиска для

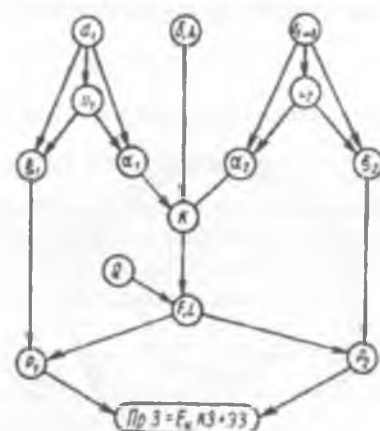


Рис. 5.18. Схема последовательности расчета единичного варианта для выбранных значений d_1 и $d_{2экв}$

каждого варьируемого параметра. Зафиксировав одну из координат (например, d_1), ищут минимум целевой функции по второй координате ($d_{2экв}$), последовательно перемещаясь вдоль нее с некоторым наперед заданным шагом до тех пор, пока значения целевой функции убывают с каждым последующим шагом. Если же значение целевой функции после очередного шага возросло, то возвращаются в предыдущую точку, фиксируют переменную $d_{2экв}$ и начинают поиск минимума по переменной d_1 и т.д. Поиск продолжают до тех пор, пока любое перемещение из некоторой точки не будет приводить к увеличению целевой функции. При необходимости более точного определения минимума из найденной оптимальной точки продолжают поиск, но с меньшим шагом.

На рис. 5.19 показан фрагмент распечатки поиска оптимума по двум переменным. Поиск был начат с точки $D1 = 0,03$ и $D2 = 0,013$. Сначала осуществлялся спуск вдоль координаты $D1$ при фиксированном значении $D2 = 0,013$ и в точке $D1 = 0,018$ была достигнута граница выделенной области поиска. Затем спуск проводился вдоль координаты $D2$ при фиксированном значении $D1 = 0,018$. В точке $D2 = 0,010$ было достигнуто минимальное значение целевой функции $z = 62$ руб/ч.

После того как поиск оптимума закончен, распечатывается изображение области поиска (рис. 5.20) и подробные данные о проектируемом оптимальном теплообменнике.

В приложении 6 приведен текст программы на языке Фортран диалоговой оптимизации теплообменника типа "труба в трубе".

```

-----ПОСЛЕ      7 -ГО ШАГА
D1, M      (<< Z (РУБ/ГОД) >>)

0.03600 * **** * **** * **** * **** * **** * **** *
0.03300 * **** * **** * **** * **** * **** * **** *
0.03000 * **** * **** * **** * 104 * **** * **** *
0.02700 * **** * **** * **** * 93 * **** * **** *
0.02400 * **** * **** * **** * 83 * **** * **** *
0.02100 * **** * **** * **** * 74 * **** * **** *
0.01800 * **** * 68 * 63 * 68 * **** * **** *
0.0040 0.0070 0.0100 0.0130 0.0160 0.0190 0.0220 D2, M
НАЙДЕНО НАИМ. ЗНАЧ. В ОБЛАСТИ ПОИСКА ? (Y/N)
СЛЕД ТОЧКА ВЫХОДИТ ЗА ПРЕДЕЛЫ ОБЛАСТИ ? (Y/N)
КООРД. БАЗОВОЙ ТОЧКИ D1 И D2, И ШАГ ПОИСКА ?

```

Рис. 5.19. Фрагмент распечатки поиска оптимума методом покоординатного спуска

```

НУЖНЫ ЛИ ПОДРОБНЫЕ ДАННЫЕ О РАССЧИТЫВАЕМОМ
ВАРИАНТЕ ? (Y/N)
D1 = 0.015 M      D2 = 0.011 M
W1 = 3.432 M/C     W2 = 2.201 M/C
RE1 = 127227.750   RE2 = 30159.730
ALFA1= 16777.523 BT/M**2/K  ALFA2= 93533.557 BT/M**2/K
KS11 = 0.017      KS12 = 0.024
P1 = 38.775 BT    P2 = 46.028 BT
K = 5003.801 BT/M**2/K
F = 0.530 M**2
L = 9.960 M
P = 85.003 BT
Z = 60.790 РУБ/ГОД

```

```

-----ПОСЛЕ      19 -ГО ШАГА
D1, M      (<< Z (РУБ/ГОД) >>)

0.01600 * **** * **** * **** * **** * **** * **** *
0.01700 * **** * **** * **** * **** * **** * **** *
0.01600 * **** * **** * **** * **** * **** * **** *
0.01500 * **** * **** * **** * 61 * 60 * 61 * **** * **** *
0.01400 * **** * **** * **** * 61 * **** * **** *
0.01300 * **** * **** * **** * **** * **** * **** *
0.01200 * **** * **** * **** * **** * **** * **** *
0.0070 0.0080 0.0090 0.0100 0.0110 0.0120 0.0130 D2, M
НАЙДЕНО НАИМ. ЗНАЧ. В ОБЛАСТИ ПОИСКА ? (Y/N)

```

Рис. 5.20. Итоговая распечатка поиска оптимальной конструкции теплообменника

Глава VI

МОДЕЛИРОВАНИЕ МАССООБМЕННЫХ ПРОЦЕССОВ

§ 6.1. Основные этапы составления математического описания процессов

С помощью математического моделирования любой массообменный процесс можно представить как большую систему, состоящую из ряда подсистем: "равновесие", "массопередача", "гидродинамика", "теплопередача", "подсистема балансов массы и энергии". Анализ этих подсистем, в свою очередь, позволяет расчленить их на подсистемы более низкого уровня. Например, для подсистемы "гидродинамика" целесообразно рассматривать макро- и микроуровни; для подсистемы "теплопередача" — общие балансы теплоты (макроуровень) и тепловое воздействие потоков фаз (микроуровень).

При этом математическое описание массообменного процесса создается на основе математических описаний отдельных подсистем — блоков, каждый из которых характеризуется собственным набором входных переменных, отражающих влияние на него других подсистем, а также внутренних переменных, обуславливающих функционирование изучаемой подсистемы.

Представление математического описания в виде совокупности подсистем (блоков) позволяет дать процедуру его построения как совокупность операций по составлению описаний отдельных подсистем, т.е. реализовать блочный принцип построения математического описания. Точность всего описания в данном случае определяется точностью описаний отдельных подсистем, а также совокупным влиянием точности представления отдельных подсистем на точность описания в целом.

Использование блочного принципа построения математических моделей рассматриваемых процессов, основанного на системном подходе, позволяет также наметить пути решения и такой практически важной проблемы, как масштабирование массообменных процессов. При применении указанного принципа масштабный переход есть не что иное, как деформация описания при изменении геометрических размеров, характеризующих аппаратное оформление процесса, т.е. 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 становится возможным осуществить масштабный переход.

§ 6.2. Описание равновесий жидкость — пар (газ) и жидкость — жидкость. Основные типы задач и алгоритмы их решения

Рассмотрим жидкую смесь, которая при температуре T и давлении P находится в равновесии со смесью паров при тех же температуре и давлении. Интересующими нас величинами являются температура, давление и составы обеих фаз. При расчете равновесия жидкость — пар можно выделить четыре основных типа задач в зависимости от того, какие переменные задаются и какие рассчитываются. К первому типу задач относится расчет состава пара и температуры смеси по известному составу жидкости и давлению. Ко второму типу относится расчет состава пара и давления по составу жидкости и температуре. Третий и четвертый типы задач включают определение состава жидкости по составу пара при известном давлении, либо температуре.

Для каждого компонента i смеси условие термодинамического равновесия задается выражением

$$f_i^v = f_i^L, \quad (6.1)$$

где f — фугитивность; индекс v — означает пар, индекс L — жидкость.

Фундаментальной задачей является установление связи этих фугитивностей с составами смесей, поскольку при разработке процессов химической технологии интересуются именно такими составами.

Фугитивность компонента в смеси зависит от температуры, давления и состава смеси. Для связи f_i^v с температурой, давлением и мольной долей удобно ввести коэффициент фугитивности

$$\Phi_i = \frac{f_i^v}{y_i P}, \quad (6.2)$$

который может быть рассчитан по диаграммам $P - v - T - y$, обычно описываемым уравнением состояния. Для смеси идеальных газов $\Phi_i = 1$.

Фугитивность компонента i в жидкой фазе связана с составом этой фазы, коэффициентом активности γ_i и фугитивностью компонента i в стандартном состоянии соотношением

$$\gamma_i = \frac{a_i}{x_i} = \frac{f_i^L}{x_i f_i^0}, \quad (6.3)$$

где a_i — активность компонента i . Стандартная фугитивность f_i^0 — это фугитивность чистой жидкости i при общем давлении системы P и $x_i = 1$.

Классическая термодинамика не позволяет определить вид зависимости коэффициента активности от состава и температуры. Тем не менее существует термодинамическое соотношение, дающее возможность коррелировать и обобщать ограниченные экспериментальные данные, это уравнение Гиббса—Дюгема. Согласно уравнению Гиббса—Дюгема, коэф-

коэффициенты активности компонентов не являются независимыми, а связаны между собой соотношением

$$\sum_{i=1}^N X_i \left(\frac{\partial \ln \gamma_i}{\partial X_i} \right)_{T, P} = 0. \quad (6.4)$$

Уравнение (6.4) можно использовать для предсказания значений коэффициента активности одного из компонентов бинарной смеси по значениям коэффициента активности другого компонента. Для этого необходимо предварительно проинтегрировать уравнение (6.4). Кроме того, уравнение (6.4) можно использовать для проверки термодинамической совместимости имеющихся экспериментальных данных по коэффициентам активности.

С практической точки зрения уравнение Гиббса–Дюгема лучше всего может быть реализовано с помощью концепции избыточной энергии Гиббса, т.е. превышения наблюдаемого уровня энергии Гиббса для смеси по отношению к величине, характерной для идеального раствора при тех же значениях температуры, давления и состава. По определению, идеальный раствор — это такой раствор, для которого все $\gamma_i = 1$. Полная избыточная энергия Гиббса G^E для смеси из N компонентов определяется соотношением

$$G^E = RT \sum_{i=1}^N n_i \ln \gamma_i, \quad (6.5)$$

где n_i — число молей компонента i .

Уравнение (6.5) определяет энергию Гиббса G^E как функцию γ_i . Применяя теперь уравнение Гиббса–Дюгема, можно связать отдельные коэффициенты активности γ_i с величиной G^E :

$$RT \ln \gamma_i = \left(\frac{\partial G^E}{\partial n_i} \right)_{T, P, n_j \neq i} \quad (6.6)$$

Молярная избыточная энергия Гиббса g^E связана с G^E простой зависимостью

$$g^E = \frac{G^E}{n_T}, \quad (6.7)$$

где n_T — общее число молей, равное $\sum_{i=1}^N n_i$.

Ключевой проблемой в расчете многокомпонентного фазового равновесия служит отыскание выражения для g^E , которое являлось бы хорошей аппроксимацией свойств смеси. Молярная избыточная энергия Гиббса g^E идеальной смеси зависит от состава смеси X_i и ее температуры T , и при наличии выражения для избыточной энергии Гиббса $g^E = g^E(X_i, T)$ окончательные выражения для коэффициентов активности могут быть легко получены с помощью уравнения (6.6).

Остановимся кратко на выражениях для коэффициентов активности, получивших наибольшее распространение.

Уравнение Вильсона. Вильсон использовал выражения для термодинамических функций в растворах полимеров для обычных растворов, однако вместо средних объемных долей ввел "локальные" объемные доли компонентов:

$$\frac{\delta E}{RT} = \sum_{i=1}^N X_i \ln \xi_i, \quad (6.8)$$

где ξ_i — "локальная" объемная доля компонента i относительно центральной молекулы того же типа.

Основная идея концепции локальных составов заключается в том, что при микроскопическом рассмотрении жидкая смесь не является однородной: состав в одной точке смеси может отличаться от состава в другой. Хотя в инженерных приложениях используется только средняя концентрация компонентов в смесях, для построения адекватного описания жидкой смеси необходимо оперировать локальными составами. Согласно концепции локальных составов, введенной Вильсоном, распределение молекул относительно центральной молекулы имеет вид

$$\frac{x_{ij}}{x_{ki}} = \frac{X_j e^{-\frac{\epsilon_{ij}}{RT}}}{X_k e^{-\frac{\epsilon_{ki}}{RT}}}, \quad (6.9)$$

где x_{ij} — "локальная" молярная доля j вокруг i ; величины ϵ_{ij} пропорциональны энергии взаимодействия молекул j и i .

С учетом введенных локальных концентраций локальные объемные доли ξ_i компонента i в уравнении (6.8) могут быть определены как

$$\xi_i = \frac{X_i V_i e^{-\frac{\epsilon_{ii}}{RT}}}{\sum_{j=1}^N X_j V_j e^{-\frac{\epsilon_{ij}}{RT}}}, \quad (6.10)$$

где V_i — молярный объем компонента i .

Подстановка выражения (6.10) в (6.8) дает зависимость избыточной энергии Гиббса от состава и температуры смеси:

$$\frac{\delta E}{RT} = - \sum_{i=1}^N X_i \ln \left(\sum_{j=1}^N X_j \Lambda_{ji} \right). \quad (6.11)$$

Дифференцирование выражения (6.11) по составу смеси приводит к широко известному уравнению Вильсона:

$$\ln \gamma_i = 1 - \ln \left(\sum_{j=1}^N X_j \Lambda_{ji} \right) - \sum_{j=1}^N \frac{X_j \Lambda_{ji}}{\sum_{k=1}^N X_k \Lambda_{ki}}, \quad (6.12)$$

где

$$\Lambda_{ij} = \frac{V_i}{V_j} \exp\left(-\frac{\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ii}}{RT}\right) \quad (6.13)$$

параметры уравнения.

Уравнение Вильсона (6.12) применимо к гомогенным смесям неэлектролитов.

Уравнения НРТЛ. Здесь, основываясь на теории свободного объема, предполагается существование в растворе двух сортов ячеек, соответствующих молекулам 1-го и 2-го типа бинарной смеси (рис. 6.1). Избыточная свободная энергия Гиббса такого двухжидкостного раствора является суммой свободной энергии, переносимой молекулами 1 из чистой жидкости в ячейки 1-го сорта, и свободной энергии, переносимой молекулами 2, т.е.

$$G^E = X_1(G_1 - G_{11}) + X_2(G_2 - G_{22}), \quad (6.14)$$

где G_1 — свободная энергия Гиббса молекул 1 в растворе, G_{11} — свободная энергия Гиббса молекул 1 в чистой жидкости. Ренон и Праусниц ввели в двухжидкостную модель концепцию локальных составов, предложенную Вильсоном, модифицировав исходное соотношение для локальных составов с помощью введения третьего параметра α_{12} , характеризующего неоднородность смеси:

$$x_{21} = \frac{X_2 \exp(-\alpha_{12}(\varepsilon_{21} - \varepsilon_{11})/RT)}{X_1 + X_2 \exp(-\alpha_{12}(\varepsilon_{21} - \varepsilon_{11})/RT)} \quad (6.15)$$

$$x_{12} = \frac{X_1 \exp(\alpha_{12}(\varepsilon_{12} - \varepsilon_{22})/RT)}{X_1 + X_2 \exp(-\alpha_{12}(\varepsilon_{21} - \varepsilon_{11})/RT)} \quad (6.16)$$

Для ячеек, содержащих молекулы 1, избыточная энергия Гиббса равна сумме всех избыточных энергий Гиббса для парных взаимодействий, испытываемых центральной молекулой 1:

$$g^{(1)} = x_{11}g_{11} + x_{21}g_{21}. \quad (6.17)$$

Для чистой жидкости, состоящей из молекул 1, имеем

$$g_0^{(1)} = g_{11}. \quad (6.18)$$

Аналогичное равенство для ячеек 2-го сорта.

Молярная избыточная энергия Гиббса для бинарного раствора g^E составит

$$g^E = x_1(g^{(1)} - g_0^{(1)}) + x_2(g^{(2)} - g_0^{(2)}). \quad (6.19)$$

Подставляя выражения (6.17), (6.18) в уравнение (6.19), получим

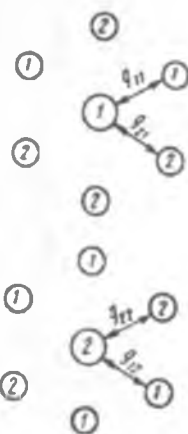


Рис. 6.1. Для типа ячеек в соответствии с двухжидкостной теорией

$$g^E = X_1 x_{21} (g_{21} - g_{11}) + X_2 x_{12} (g_{12} - g_{22}). \quad (6.20)$$

Дифференцирование уравнения (6.20) в соответствии с уравнением (6.6) дает искомые выражения для коэффициентов активности. В случае N -компонентной смеси получаем

$$\frac{g^E}{RT} = \sum_{i=1}^N X_i \frac{\sum_{j=1}^N \tau_{ji} G_{ji} X_j}{\sum_{k=1}^N G_{ki} X_k}, \quad (6.21)$$

$$\ln \tau_i = \frac{\sum_{j=1}^N \tau_{ji} G_{ji} X_j}{\sum_{k=1}^N G_{ki} X_k} + \sum_{j=1}^N \frac{x_j G_{ij}}{\sum_{k=1}^N G_{kj} X_k} \times \left(\tau_{ij} - \frac{\sum_{k=1}^N X_k \tau_{kj} G_{kj}}{\sum_{k=1}^N G_{kj} X_k} \right), \quad (6.22)$$

где

$$\tau_{ij} = (g_{ij} - g_{jj})/RT. \quad (6.23)$$

Уравнение ЮНИКВАК (UNIQVAC — universal quasy chemical). Праусницем и другими учеными на основе квазихимической теории Гугенгейма было получено выражение для избыточной энергии Гиббса полностью или частично смешиваемых систем. Так как исходная модель Гугенгейма ограничивается малыми молекулами, близкими по размеру, то для смесей, содержащих молекулы различного размера и формы, вводится концепция локальной поверхностной доли молекул, определяемой аналогично локальным составам, введенным Вильсоном:

$$\theta_{11} = \frac{\theta_1}{\theta_1 + \theta_2 \exp \left[- \frac{(u_{21} - u_{11})}{RT} \right]}, \quad (6.24)$$

$$\theta_{22} = \frac{\theta_2}{\theta_2 + \theta_1 \exp \left[- \frac{(u_{12} - u_{22})}{RT} \right]}, \quad (6.25)$$

где $(u_{21} - u_{11})$ и $(u_{12} - u_{22})$ — параметры уравнения.

Мольная избыточная энергия Гиббса в случае бинарного раствора есть

$$g^E = \frac{\Delta A}{n_1 + n_2} - RT (X_1 \ln X_1 + X_2 \ln X_2), \quad (6.26)$$

где ΔA — энергия смешения Гельмгольца; n — число молей компонента.

Используя выражение для энергии смешения Гельмгольца по квазихимической теории и выражения (6.24), (6.25), после подстановки в (6.26) получаем

$$\begin{aligned} \frac{\Delta A}{RT} = & X_1 \ln \frac{\Phi_1}{X_1} + X_2 \ln \frac{\Phi_2}{X_2} + \left(\frac{z}{2}\right) (q_1 X_1 \ln \frac{\theta_1}{\Phi_1} + \\ & + q_2 X_2 \ln \frac{\theta_2}{\Phi_2}) - q_1 X_1 \ln [\theta_1 + \theta_2 \tau_{21}] - \\ & - q_2 X_2 \ln [\theta_2 + \theta_1 \tau_{12}] \end{aligned} \quad (6.27)$$

или в случае N -компонентной смеси:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta A}{RT} = & \sum_{i=1}^N X_i \ln \frac{\Phi_i}{X_i} + \frac{z}{2} \sum_{i=1}^N q_i X_i \ln \frac{\theta_i}{\Phi_i} - \\ & - \sum_{i=1}^N q_i X_i \ln \left(\sum_{j=1}^N \theta_j \tau_{ji} \right). \end{aligned} \quad (6.28)$$

Дифференцируя уравнение (6.28) в соответствии с уравнением (6.6), получаем выражения для коэффициентов активности компонентов в смеси электролитов:

$$\begin{aligned} \ln \gamma_i = & \ln \frac{\Phi_i}{X_i} + \frac{z}{2} q_i \ln \frac{\theta_i}{\Phi_i} + l_i - \frac{\Phi_i}{X_i} \sum_{j=1}^N X_j l_j - \\ & - q_i \ln \left(\sum_{j=1}^N \theta_j \tau_{ji} \right) + q_i - q_i \sum_{j=1}^N \frac{\theta_j \tau_{ji}}{\sum_{k=1}^N \theta_k \tau_{kj}}, \end{aligned} \quad (6.29)$$

где

$$l_j = \left(\frac{z}{2}\right) (r_j - q_j) - (r_j - 1), \quad (6.30)$$

r_j — число сегментов в молекуле j ; q_j — параметр, пропорциональный внешней поверхности молекулы j ; z — координационное число.

Средняя поверхностная доля θ и средняя сегментная доля Φ определяются выражениями

$$\theta_i = \frac{q_i X_i}{\sum_{j=1}^N q_j X_j}, \quad (6.31)$$

$$\Phi_i = \frac{r_i X_i}{\sum_{j=1}^N r_j X_j}. \quad (6.32)$$

Величины τ_{ij} и τ_{ji} являются параметрами уравнения, определяемыми из экспериментальных данных.

Основное преимущество уравнения ЮНИКВАК заключается в том, что при наличии двух устанавливаемых параметров для каждой бинарной пары оно обеспечивает хорошее воспроизведение равновесий жидкость-пар и жидкость-жидкость для множества жидких смесей неэлектролитов.

Метод ЮНИФАК. При определении термодинамических свойств часто бывает удобным рассматривать молекулу как агрегат функциональных групп; тогда некоторые термодинамические свойства чистых газов и жидкостей могут быть рассчитаны путем суммирования групповых составляющих. Было сделано несколько попыток создать методы расчета теплоты смешения и коэффициентов активности по групповым составляющим. Упомянем два наиболее распространенные из них. Эти методы, носящие название АСОГ (Analytical Solution of Groups) и ЮНИФАК (Universal Functional Model of Coefficient Activity), в принципе похожи, но разнятся в деталях.

В основе любого метода расчета по групповым составляющим лежит идея, заключающаяся в том, что хотя химическая технология имеет дело с тысячами химических соединений, число функциональных групп, из которых состоят эти соединения, значительно меньше.

Любой метод групповых составляющих обязательно является приближенным, поскольку вклад данной группы в одну молекулу совсем необязательно окажется таким же в другой молекуле. Основой методов групповых составляющих является предположение об аддитивности: вклад одной группы в молекулу не зависит от вкладов других групп. Число различных групп должно оставаться небольшим, однако достаточным, чтобы учитывать существенные влияния молекулярной структуры на свойства. Распространение концепции групповых составляющих на смеси чрезвычайно интересно, поскольку число чистых жидкостей, используемых в промышленности, очень велико; тысячи, возможно, миллионы жидких смесей могут быть составлены из 50 или максимум 100 функциональных групп.

Основная идея модели "раствора групп" заключается в том, что для расчета фазового равновесия систем, по которым нет экспериментальных данных, используются имеющиеся данные по фазовому равновесию. В основе метода лежат две основные концепции:

1. Обработка экспериментально определенных значений коэффициентов активности для получения параметров, характеризующих взаимодействия между парами структурных групп в неэлектролитических системах.

2. Использование этих параметров для расчета коэффициентов активности в других системах, которые экспериментально не исследовались, но содержат те же самые функциональные группы.

Молекулярный коэффициент активности разделяется на две части. Одна часть характеризует вклад, обусловленный различиями в размере молекул, а другая часть — вклад, обусловленный молекулярными взаимодействиями.

В методе ЮНИФАК непосредственно используется комбинаторная часть коэффициентов активности ЮНИКВАК γ_i^C , входящая в следующее выражение для молекулярного коэффициента активности:

$$\ln \gamma_i = \ln \gamma_i^C + \ln \gamma_i^R, \quad (6.33)$$

$$\ln \gamma_i^C = \ln \frac{\phi_i}{X_i} + \frac{z}{2} q_i \ln \frac{\theta_i}{\phi_i} + l_i - \frac{\phi_i}{X_i} \sum_{j=1}^N X_j l_j, \quad (6.34)$$

$$\ln \gamma_i^R = q_i \left[1 - \ln \left(\sum_{j=1}^N \theta_j \tau_{ji} \right) - \sum_{j=1}^N \frac{\theta_j \tau_{ji}}{\sum_{k=1}^N \theta_k \tau_{kj}} \right]. \quad (6.35)$$

Это уравнение включает только свойства чистых компонентов. Параметры r_i и q_i определяются суммированием групповых параметров объема и площади (R_k и Q_k):

$$r_i = \sum v_k^{(i)} R_k; \quad q_i = \sum v_k^{(i)} Q_k, \quad (6.36)$$

где $v_k^{(i)}$ — число групп типа k в молекуле i .

Групповые параметры R_k и Q_k рассчитываются по значениям ван-дер-Ваальсовского группового объема V_{wk} и по значениям площадей поверхности A_{wk} :

$$R_k = \frac{V_{wk}}{15,17}; \quad Q_k = \frac{A_{wk}}{2,5 \cdot 10^9}. \quad (6.37)$$

Коэффициенты 15,17 и $2,5 \cdot 10^9$ определены по значениям объема и площади внешней поверхности группы CH_2 в полиэтилене.

Остаточная часть коэффициента активности (энергетическая часть, уравнение (6.35)) заменяется на выражение, полученное при использовании концепции "растворов групп":

$$\ln \gamma_i^R = \sum_{\text{по всем группам}} v_k^{(i)} (\ln \Gamma_k - \ln \Gamma_k^{(i)}), \quad (6.38)$$

где Γ_k — остаточный коэффициент активности группы k ; $\Gamma_k^{(i)}$ — остаточный коэффициент активности группы k в растворе, содержащем только молекулы типа i . В уравнение (6.38) член $\ln \Gamma_k^{(i)}$ введен для достижения нормализации, т.е. все коэффициенты активности γ_i становятся равными 1 при $X_i \rightarrow 1$.

Коэффициент активности группы Γ_k определяется из выражения, полученного с уравнением (6.35):

$$\ln \Gamma_k = Q_k \left[1 - \ln \left(\sum_{m=1}^{N_{\text{гр}}} \theta_m \psi_{mk} \right) - \sum_{m=1}^{N_{\text{гр}}} \frac{\theta_m \psi_{km}}{\sum_{n=1}^{N_{\text{гр}}} \theta_n \psi_{nm}} \right]. \quad (6.39)$$

Уравнение (6.39) применимо и к $\Gamma_k^{(i)}$. В уравнении (6.39) θ_m — поверхностная доля группы m , а суммы включают все различные группы. Величина θ_m рассчитывается подобно θ_i , т.е.

$$\theta_m = \frac{Q_m X_m}{\sum_{n=1}^{N_{gr}} Q_n X_n},$$

(6.40)

где X_m — мольная доля группы m в смеси.

Параметр группового взаимодействия ψ_{mn} определяется выражением

$$\psi_{mn} = \exp\left(-\frac{U_{mn} - U_{nn}}{RT}\right) = \exp\left(-\frac{a_{mn}}{T}\right),$$

(6.41)

где U_{mn} — мера энергии взаимодействия групп m и n .

Параметры группового взаимодействия a_{mn} должны рассчитываться по экспериментальным данным о фазовом равновесии. Следует отметить, что a_{mn} измеряется в кельвинах и что $a_{mn} \neq a_{nm}$. Для многих групп параметры группового взаимодействия уже рассчитаны и приведены в таблицах.

Равновесие газ — жидкость. Раствор газа в жидкости существует совместно с находящимся над жидкостью газом. При этом содержание газа в растворе зависит не только от рода газа и жидкости, а также от давления, температуры и состава газовой фазы. Данное равновесие аналогично парожидкостному равновесию. Отличие здесь состоит в том, что газовая фаза находится в надкритической области (газ неконденсируем) при обычных давлениях и температурах. При этом растворимость газа в жидкой фазе обычно мала.

При равновесии фугитивность газа равна фугитивности жидкости. Отсюда получаем значение константы фазового равновесия

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} = \frac{f_i^0 \gamma_i}{P \Phi_i},$$

(6.42)

где Φ_i — коэффициент фугитивности в газе.

Основная трудность в расчете равновесий газ — жидкость состоит в определении коэффициента активности в жидкой фазе γ_i и коэффициента фугитивности в газовой фазе Φ_i . Методы оценки коэффициентов активности в растворах неэлектролитов уже были рассмотрены. Оценка же коэффициента фугитивности в газовой фазе может быть выполнена на основании уравнения состояния (Ван-дер-Ваальса, вириального и др.). Однако часто растворимость газа в жидкости очень мала и в этих условиях жидкая фаза стремится к идеальной. Кроме того, при умеренных давлениях неидеальность газовой фазы незначительна. Тогда стремление того или иного компонента улетучиваться из жидкой фазы в газовую не зависит от присутствия других компонентов и система соответствует идеальной, для которой справедлив закон Генри:

$$P_i^s = K_i x_i,$$

(6.43)

где P_i^s — равновесное давление газа над раствором.

Для идеальных растворов K_i зависит только от температуры, увеличиваясь с возрастанием последней; при этом растворимость газа уменьшается. Поскольку закон Генри применим к разбавленным растворам, он

достаточно точно описывает равновесие для плохо растворимых газов. Для жидкостей с сравнительно высокой растворимостью он справедлив лишь при низких концентрациях.

Расчет парожидкостных равновесий. Ранее мы рассмотрели возможные типы задач, возникающие при расчете парожидкостных равновесий. Так как их решения аналогичны, то приведем только одну из них: определение состава пара и температуры кипения смеси по заданному составу жидкой фазы и давлению.

Система уравнений математического описания включает систему уравнений равновесия

$$y_i P = x_i \gamma_i (x, T) P_i^0(T), \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (6.44)$$

и стехиометрическое соотношение

$$\sum_{i=1}^N y_i - 1 = \sum_{i=1}^N \frac{x_i \gamma_i P_i^0}{P} - 1 = 0. \quad (6.45)$$

В уравнениях (6.44), (6.45) паровая фаза предполагается идеальной ($\phi_i = 1$). Зависимость коэффициента активности в жидкой фазе γ_i от состава и температуры определяется одним из уравнений парожидкостного равновесия (Вильсона, НРТЛ, ЮНИКВАК, ЮНИФАК).

Искомые переменными являются: y_i (N значений), T . Всего имеется $N+1$ переменных. Так как система уравнений (6.44), (6.45) нелинейная, то решение ее проводится итерационными методами. Рассмотрим алгоритм решения уравнений (6.44), (6.45) методом Ньютона.

1. Задают начальное приближение температуры кипения T_0 .
2. Для заданного состава и температуры рассчитывают коэффициенты активности компонентов γ_i .
3. По уравнению (6.44) рассчитывают состав пара y_i .
4. По уравнению (6.45) уточняют температуру кипения смеси T .
5. Проверяют выполнение условия

$$|T - T'| < \epsilon. \quad (6.46)$$

Если условие (6.46) выполняется, то расчет заканчивают. В противном случае расчет продолжают с п. 2. В приложении 7 приведена программа EQU для расчета парожидкостного равновесия.

Равновесие в системе жидкость — жидкость. Описание равновесия между жидкими фазами во многом аналогично описанию равновесия системы жидкость — пар. Описанием таких систем являются покомпонентные уравнения фазового равновесия, дополненные уравнениями материального баланса и стехиометрическими соотношениями. При расчетах равновесия в системах жидкость — жидкость можно выделить следующие две задачи: первая задача состоит в определении состава равновесных фаз при заданной температуре по общему составу каждого компонента, присутствующего в смеси; вторая задача заключается в определении состава одной из равновесных фаз по заданному составу другой при известной температуре.

Так как математическое описание и решение указанных задач во многом аналогично, то ограничимся только первой задачей.

В качестве исходной информации задачи расчета составов равновесных жидких фаз используются температура системы и количество молей каждого компонента. Неизвестными являются $2N$ составов (N — число компонентов в системе), число молей в первой фазе $M^{(1)}$ и во второй фазе $M^{(2)}$, т.е. всего имеется $2N + 2$ неизвестных.

Описание состоит из:

Уравнений материального баланса:

$$M^F Z_i = M^{(1)} x_i^{(1)} + M^{(2)} x_i^{(2)} \quad (i = 1, \dots, N), \quad (6.47)$$

где M^F — общее количество молей в смеси; Z_i — общий состав смеси;

Уравнений фазового равновесия:

$$x_i^{(1)} \gamma_i^{(1)} = x_i^{(2)} \gamma_i^{(2)} \quad (i = 1, \dots, N); \quad (6.48)$$

двух стехиометрических соотношений:

$$\sum_{i=1}^N x_i^{(1)} = 1, \quad \sum_{i=1}^N x_i^{(2)} = 1. \quad (6.49)$$

Систему уравнений (6.47)–(6.49) можно записать в эквивалентной форме:

$$x_i^{(1)} = \frac{M^F Z_i}{M^{(1)} (1 - K_i) + M^F K_i}, \quad i = 1, \dots, N, \quad (6.50)$$

$$x_i^{(2)} = K_i x_i^{(1)}, \quad i = 1, \dots, N, \quad (6.51)$$

$$D = \sum_{i=1}^N x_i^{(1)} - \sum_{i=1}^N x_i^{(2)} = 0, \quad (6.52)$$

где K_i — константа равновесия i -го компонента между фазами.

Число молей в первой фазе $M^{(1)}$ определяется с помощью метода касательных из уравнения

$$D(M^{(1)}) = 0. \quad (6.53)$$

Для совместного решения систем уравнений баланса и равновесия произведем следующую подстановку:

$$\frac{x_i^{(1)} - x_i^{(1)*}}{x_1^{(1)} - x_1^{(1)*}} = \lambda_i, \quad i = 2, \dots, N-1, \quad (6.54)$$

где

$$\lambda_i = \frac{x_i^{(2)*} - x_i^{(1)*}}{x_1^{(2)*} - x_1^{(1)*}}, \quad i = 2, \dots, N-1. \quad (6.55)$$

Величины $x_i^{(j)*}$ соответствуют концентрациям фаз, полученным в результате решения системы уравнений материального баланса при заданных константах равновесия K_i . После такой подстановки решение проводится относительно следующего набора неизвестных:

$$\begin{aligned} x_1 &= x_1^{(1)}, \\ x_2 &= x_2^{(2)}, \\ &\dots \dots \dots \\ x_N &= x_{N-1}^{(2)} \end{aligned} \quad (6.56)$$

Так как система уравнений фазового равновесия нелинейна относительно искомых составов, то для ее решения используется метод Ньютона.

Приведем теперь алгоритм расчета составов равновесных жидких фаз.

1. Задают число компонентов, температуру, общий состав смеси и начальные оценки констант фазового равновесия K_i .

2. Рассчитывают по уравнению (6.53) число молей в первой фазе $M^{(1)}$ (методом касательных).

3. Рассчитывают приращения по искомым переменным $\Delta x_1, \Delta x_2, \dots, \Delta x_N$ (линеаризация уравнения (6.48)).

4. Определяют новые значения искомых переменных

$$\begin{aligned} x_1 &= x_1 + \alpha \Delta x_1, \\ x_2 &= x_2 + \alpha \Delta x_2, \\ &\dots \dots \dots \\ x_N &= x_N + \alpha \Delta x_N. \end{aligned} \quad (6.57)$$

5. Оценивают новое приближение констант фазового равновесия K_i (уравнение (6.51)).

6. Рассчитывают величины невязок r_{in} системы уравнений фазового равновесия.

Если выполняются условия

$$\begin{aligned} r_i &< \epsilon_1, \quad i, i = 1, \dots, N \\ \Delta x_j &< \epsilon_2, \end{aligned} \quad (6.58)$$

то расчет заканчивают и выводят результаты $(x_i^{(1)}, x_i^{(2)}, M^{(1)}, M^{(2)})$. В противном случае продолжают расчет с п. 2.

§ 6.3. Детерминированный и стохастический подходы к описанию массопередачи

Расчет аппаратуры для осуществления процессов массопередачи в основном сводится к определению двух размеров: диаметра и высоты (или длины) зоны контакта. Диаметр (или сечение) аппарата определяется

заданной производительностью по сплошной фазе (газу, пару) и линейной скоростью потока в полном сечении аппарата, определяемой из гидродинамических условий его работы.

Высота аппарата определяется из заданных начальных и конечных концентраций выделяемых компонентов, движущей силы и скорости переноса вещества.

Детерминированное описание переноса вещества в процессах массопередачи основано на фундаментальных законах диффузии Фика.

Уравнение Фика (молекулярный перенос):

$$q_C = -D_M \frac{dC}{dz} \quad (6.59)$$

Уравнение Фика (конвективный перенос):

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial C}{\partial x} W_x + \frac{\partial C}{\partial y} W_y + \frac{\partial C}{\partial z} W_z = D_M \nabla^2 C \quad (6.60)$$

Уравнение Ньютона:

$$q_C = K \Delta C \quad (6.61)$$

Параметры детерминированной составляющей:

$$N_{Nu_D} = N_{sh} \frac{a l}{D_M}; \quad N_{Pr_D} = N_{Sc} \frac{\nu}{D_M} \quad (6.62)$$

Приведенные уравнения могут быть приведены к безразмерному виду, а связь между безразмерными числами устанавливается опытным путем с соблюдением принципов подобия. Однако следует подчеркнуть, что представленных уравнений оказывается недостаточно, поскольку они не учитывают стохастичности процесса массопередачи и поэтому пригодны только для случая однофазного потока, обтекающего твердое тело, т.е. для случая с фиксированной границей раздела фаз.

Для широко распространенных в промышленности процессов разделения, таких, как процессы абсорбции, ректификации, экстракции, т.е. для процессов с так называемой свободной поверхностью раздела, существенно изменяющейся от взаимодействия двухфазных потоков, использование зависимостей, характеризующих детерминированные параметры, не приводит к желаемым результатам и необходимо прибегать к математическому моделированию, чтобы учесть стохастические (вероятностные) составляющие процессов.

Учет стохастической составляющей позволяет определять важную характеристику процессов массопередачи — распределение концентраций компонентов взаимодействующих потоков по длине зоны контакта.

В силу стохастического характера явлений массопереноса достижение равновесного состояния подчинено вероятностным законам распределения энергии и массы в пространстве и во времени. К наиболее существенным причинам неравновесности массообмена в промышленных условиях

относит: неравномерность распределения частиц потока по времени пребывания; обратный заброс фаз в результате механического уноса; неидеальное время контакта фаз. Степень достижения равновесия на ступени разделения определяется гидродинамикой потоков жидкости и пара, взаимодействием, а следовательно, временем пребывания в аппарате. В реальных условиях неравномерность распределения элементов потока во времени пребывания обусловлена в первую очередь неравномерностью профиля скоростей, турбулизацией потоков, различием скоростей переноса отдельных компонентов, градиентами температуры и давления. Поэтому при заданных конструктивных характеристиках аппарата время контакта фаз, определяемое гидродинамической структурой потоков, может оказаться недостаточным для того, чтобы привести к равновесию в массообменном пространстве является важнейшим параметром для характеристики завершенности процесса массопереноса и в общем случае находится в сложной функциональной зависимости от гидродинамики потоков, физико-химических свойств разделяемой смеси. Ясно, что при отклонении гидродинамических условий от идеальных обеспечение максимально возможного приближения к равновесному состоянию приводит к существенным дополнительным капитальным и эксплуатационным затратам.

Возможны два подхода к оценке влияния структуры потоков на время пребывания пара и жидкости на ступени разделения. Во-первых, использование функций распределения времени пребывания элементов потока в аппарате. В этом случае необходимо иметь модельную или экспериментальную кривую отклика на импульсное возмущение. Такой подход предполагает наличие экспериментального объекта и в большей степени пригоден к анализу действующих процессов. Во-вторых, использование модельных представлений структуры потоков жидкости и пара на ступени разделения. В этом случае гидродинамические условия описываются типовыми моделями структуры потоков в виде систем конечных или дифференциальных уравнений, а степень достижения равновесных условий оценивается влиянием структуры потоков на кинетику процесса.

При расчете массообменных процессов неравномерность распределения элементов потока на тарелках обычно учитывается по локальным характеристикам ограниченных объемов массообменного пространства, в пределах которых допускается идеализированное представление о механизме переноса вещества. Выделенные таким образом локальные объемы однородными свойствами описываются типовыми гидродинамическими моделями. От числа, типа элементарных моделей и способа их взаимосвязей зависит точность описания структуры потоков в целом. Рассмотрим отдельные типовые модели структуры движения жидкости по тарелке реакционной колонны.

При полном перемешивании жидкости на тарелке согласно условию материального баланса получим

$$L(x_{i+1} - x_i) - VK_{0x}^a(x_i - x_i^*) = 0, \quad (6.63)$$

где L — количество жидкости, поступающей на i -ю тарелку, моль/с; x — состав жидкости, мол. доли; V — объем жидкости на тарелке м^3 ; K_{0x}^a — объемный коэффициент массопередачи, моль/(\(\text{м}^3 \cdot \text{с}\)).

Время пребывания жидкости на тарелке, выраженное через отношение $V\gamma/L$ (γ — плотность жидкости, моль/\(\text{м}^3\)), определяется равенством

$$t = \frac{\gamma}{K_{0x}^a} \frac{x_{i+1} - x_i}{x_i - x_i^*}. \quad (6.64)$$

Принимая во внимание, что коэффициент полезного действия (к.п.д.) тарелки, по Мэрффи, составляет

$$E_{0x} = \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1} - x_i^*},$$

выражение для времени пребывания можно переписать в виде

$$t = \frac{\gamma}{K_{0x}^a} \frac{E_{0x}}{1 - E_{0x}}. \quad (6.65)$$

Таким образом, время пребывания жидкости на тарелке непосредственно связано с эффективностью тарелки (E) и коэффициентом массопередачи. Если учесть, что к.п.д. является формальным выражением степени достижения равновесного состояния (для равновесной ступени эта величина равна единице), то из последнего выражения следует, что достижение равновесных условий на ступени разделения зависит от условий массопередачи. Чем выше коэффициент массопередачи, тем меньше время пребывания (объем удерживаемой жидкости), необходимое для достижения максимальной разделительной способности тарелки. Из (6.64) следует, что состав жидкости, покидающей ступень разделения, как функция времени пребывания определяется выражением

$$x_i = \frac{x_{i+1} + t \frac{K_{0x}^a}{\gamma} x_i^*}{t \frac{K_{0x}^a}{\gamma} + 1}. \quad (6.66)$$

При движении жидкости на тарелке в режиме полного вытеснения можно записать уравнение материального баланса в виде

$$\frac{L}{\gamma} \frac{dx}{dV} = \frac{K_{0x}^a}{\gamma} (x - x^*) \quad (6.67)$$

и после интегрирования относительно времени пребывания получаем

$$t = \frac{\gamma}{K_{0x}^a} \ln \left(\frac{1}{1 - E_{0x}} \right). \quad (6.68)$$

Состав жидкости, покидающей n -ю ступень, в этом случае определяется выражением

$$x_n = (x_{n+1} - x_n^*) e^{-\frac{K_{0x} a}{\gamma} t} + x_n^*. \quad (6.69)$$

Для ячеечной модели движения жидкости, определяемой как последовательность ячеек полного перемешивания, время пребывания в каждой ячейке имеет вид (6.65), а полное время пребывания равно сумме времени пребывания в отдельных ячейках.

Диффузионная модель, описывающая структуру потоков, запишется в виде

$$\frac{D_l}{v^2} \frac{d^2 x}{dt^2} - \frac{dx}{dt} - \frac{K_{0x} a}{\gamma} (x - x^*) = 0, \quad (6.70)$$

где D_l — коэффициент продольного перемешивания, m^2/c ; v — скорость жидкости на тарелке, m/c .

Используя граничные условия

$$x = x_{i+1} \Big|_{t=0}; \quad \frac{dx}{dt} = 0 \Big|_{t=t_k}, \quad (6.71)$$

решение уравнения (6.70) можно записать в виде

$$\frac{x - x^*}{x_{i+1} - x^*} = \frac{\frac{s_2 t}{e^{s_2 t}}}{1 - \frac{s_2}{s_1} e^{(s_2 - s_1)t_k}} - \frac{\frac{s_2}{s_1} e^{(s_2 - s_1)t_k} e^{s_1 t}}{1 - \frac{s_2}{s_1} e^{(s_2 - s_1)t_k}}, \quad (6.72)$$

$$s_{1,2} = \frac{1}{2 \frac{D_l}{v^2}} \left(1 \pm \sqrt{1 + 4 \frac{D_l}{v^2} \frac{K_{0x} a}{\gamma}} \right). \quad (6.73)$$

Выражение (6.72) при $t = t_k$ примет вид

$$1 - E_{0x} = \frac{e^{s_2 t_k} \left[1 - \frac{s_2}{s_1} \right]}{1 - \frac{s_2}{s_1} e^{(s_2 - s_1)t_k}}. \quad (6.74)$$

Решив это уравнение относительно времени пребывания, получим

$$t_k = \ln \left(\frac{1 - E_{0x}}{(1 - E_{0x}) \frac{s_2}{s_1} e^{-s_1 t_k}} + \left(1 - \frac{s_2}{s_1} \right) \frac{1}{s_2} \right). \quad (6.75)$$

Решение уравнения диффузионной модели движения жидкости на тарелке получено в предположении линейной равновесной зависимости. Однако для других случаев такое решение можно получить лишь численно.

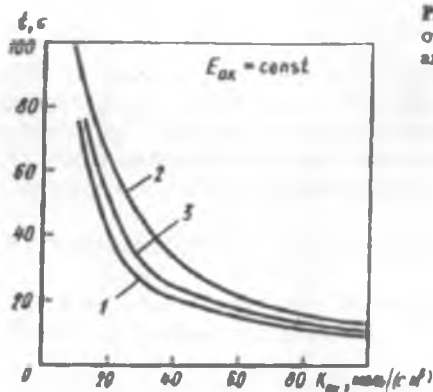


Рис. 6.2. Зависимость времени пребывания от коэффициента массопередачи: 1 — идеальное вытеснение; 2 — идеальное смешивание; 3 — диффузионная модель

Характерные зависимости времени пребывания t как функции коэффициента массопередачи K_{0x} и состава жидкости x_n как функции времени пребывания при разделении бинарных смесей для отдельных моделей при-

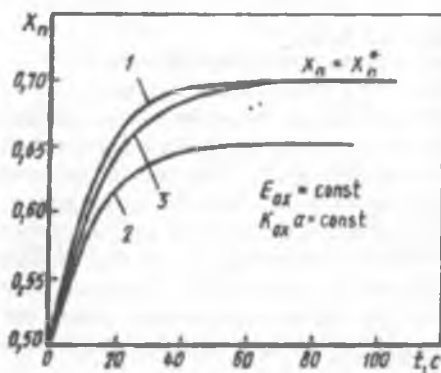


Рис. 6.3. Зависимость выходной концентрации от времени пребывания: 1 — идеальное вытеснение; 2 — идеальное смешивание; 3 — диффузионная модель

ведены на рис. 6.2 и 6.3. Как следует из рис. 6.3, для достижения равновесных условий необходимо обеспечивать достаточно большое время пребывания жидкости на тарелках.

§ 6.4. Массопередача в системах жидкость — пар (газ) и жидкость — жидкость

Перенос вещества из одной фазы в другую включает три основных этапа: 1) подвод вещества из объема фазы к границе раздела фаз; 2) перенос вещества через границу раздела фаз; 3) перенос вещества от границы раздела в объем второй фазы.

Перенос вещества внутри фазы происходит путем молекулярной, конвективной и турбулентной диффузий. В неподвижной среде перенос проис-

ходит только путем молекулярной диффузии, в движущейся среде — путем молекулярной и конвективной диффузии. При турбулентном движении перенос происходит главным образом путем турбулентной диффузии.

Рассмотрим основные уравнения массоотдачи и массопередачи. При отсутствии равновесия между фазами происходит перенос вещества из одной фазы в другую; этот процесс называют *массопередачей*. Массопередача является сложным процессом, состоящим из процессов переноса вещества в пределах каждой из фаз (массоотдача) и переноса вещества через границу раздела фаз. Обычно считают, что сопротивление переходу вещества на границе фаз отсутствует. Такое предположение равносильно допущению о существовании в каждый момент времени равновесия у поверхности соприкосновения фаз.

Количество компонента i , переносимого в направлении z через поверхность F за единицу времени, составляет

$$W_i = -DF \frac{dC_i}{dz}. \quad (6.76)$$

Уравнение (6.76) выражает закон Фика, причем в нем градиент химического потенциала приближенно замещен на градиент концентрации.

При рассмотрении процесса массопередачи за движущую силу принимают разность между фактической концентрацией компонента в одной из фаз и равновесной концентрацией в ней данного компонента. Указанные представления о процессах массоотдачи и массопередачи равносильны предположению о существовании в каждой из фаз некоторого сопротивления переходу вещества. В отсутствие сопротивления у поверхности раздела общее сопротивление процессу складывается из сопротивлений в каждой из фаз, т.е. имеет место аддитивность фазовых сопротивлений.

Уравнение массоотдачи, т.е. переноса вещества к поверхности соприкосновения фаз (или от этой поверхности), записывается в виде

$$W_i = \beta F \Delta, \quad (6.77)$$

где W_i — количество вещества, переносимого в единицу времени; F — поверхность соприкосновения фаз; Δ — движущая сила (разность концентраций); β — коэффициент пропорциональности, называемый *коэффициентом массоотдачи* и представляющий собой количество вещества, переносимое внутри фазы в единицу времени через единицу поверхности при движущей силе, равной единице.

Величина коэффициента массоотдачи зависит от характера движения фазы и ее свойств. В настоящее время получены распространение следующие модели механизма переноса вещества в фазе: пленочная модель, согласно которой коэффициент массоотдачи пропорционален коэффициенту молекулярной диффузии, модель проникания и модель обновления поверхности раздела фаз. В последних двух моделях процесс массоотдачи рассматривается как нестационарный, а коэффициент массоотдачи пропорционален коэффициенту молекулярной диффузии в степени 0,5.

Пусть вещество передается из газовой (паровой) фазы с концентра-

иной y в жидкую с концентрацией x . Тогда уравнения массоотдачи для газовой и жидкой фаз запишутся в виде

$$W_i = \beta_y F (y_i - y_{pi}), \quad (6.78)$$

$$W_i = \beta_x F (x_{pi} - x_i). \quad (6.79)$$

Величина W_i в уравнениях (6.78), (6.79) одна и та же, поскольку весь компонент, переносимый в газовой фазе к поверхности раздела, переходит в жидкую фазу.

Исходя из условия равновесия фаз у поверхности их соприкосновения ($y_p = x_p$) после преобразований получим

$$W_i = K_y F (y_i - y_i^*), \quad (6.80)$$

где K_y определяется уравнением

$$\frac{1}{K_y} = \frac{1}{\beta_y} + \frac{m}{\beta_x} \quad (6.81)$$

и называется коэффициентом массопередачи, отнесенным к концентрации газа.

Уравнение (6.80) описывает переход вещества из газовой фазы в жидкую и называется уравнением массопередачи. Движущей силой здесь является разность концентраций ($y_i - y_i^*$).

Систему уравнений (6.78), (6.79) можно преобразовать также к виду

$$W_i = K_x F (x^* - x), \quad (6.82)$$

где x^* — концентрация жидкости, равновесная с концентрацией газа $y = y/m^0$, а движущей силой служит разность концентраций ($x^* - x$).

Величина K_x представляет собой коэффициент массопередачи, отнесенный к концентрации жидкости, и определяется из соотношения

$$\frac{1}{K_x} = \frac{1}{m\beta_y} + \frac{1}{\beta_x}. \quad (6.83)$$

В уравнении (6.81) член $\frac{1}{\beta_y}$ характеризует сопротивление массопередаче, оказываемое газовой фазой, а член m/β_x — сопротивление жидкой фазы. Сумма этих величин $1/K_y$ есть общее сопротивление массопередаче. Таким образом, уравнение (6.81) выражает аддитивность фазовых сопротивлений.

§ 6.5. Ректификация многокомпонентных смесей

Модель ректификационной колонны. Процесс ректификации — один из наиболее распространенных процессов разделения смесей в химической технологии. По определению, процессом ректификации называется термодинамический процесс, при котором смесь разделяется на две фазы: пар и жидкость. В процессе ректификации смесь разделяется на две фазы: пар и жидкость. В процессе ректификации смесь разделяется на две фазы: пар и жидкость.

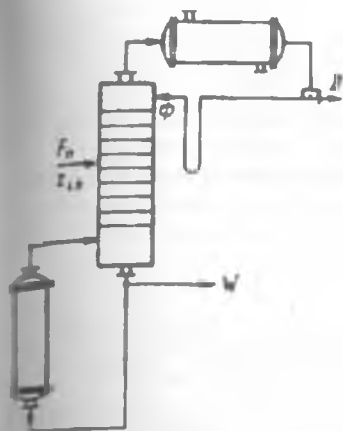


Рис. 6.4. Схема ректификационной установки

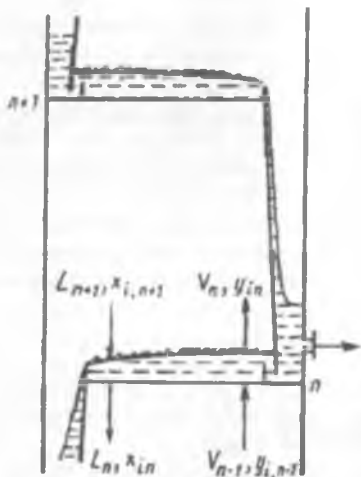


Рис. 6.5. Схема потоков жидкости в паре на тарелке ректификационной колонны

ческий способ разделения смесей путем многократного испарения и конденсации смеси, сопровождающиеся тепло- и массообменом. Таким образом, процесс ректификации включает связанные между собой явления тепло- и массопередачи. Остановимся теперь на математическом описании ректификации. Для определенности будем рассматривать тарельчатую ректификационную колонну, содержащую N тарелок, в которой происходит разделение смеси из M компонентов (рис. 6.4).

Исходное питание в количестве F_n состава z_{in} подается на n -ю тарелку колонны. Сверху колонны отбирается дистиллят в количестве D состава x_{D1} , а снизу колонны — кубовый продукт в количестве W состава x_{W1} .

Модель ректификационной колонны основывается на следующих допущениях: 1) паровая фаза принимается идеальной; 2) жидкость на тарелке полностью перемешана.

Схема потоков на тарелках колонны изображена на рис. 6.5.

Математическое описание включает следующие уравнения:

общего материального баланса на тарелках колонны

$$V_{n-1} + L_{n+1} + F_n - V_n - L_n - S_n = 0, \quad (6.84)$$

покомпонентного материала баланса

$$V_{n-1} y_{i, n-1} + L_{n+1} x_{i, n+1} + F_n z_{in} - V_n y_{in} - L_n x_{in} - S_n x_{in} = 0, \quad (6.85)$$

теплового баланса

$$V_{n-1} H_{n-1} + L_{n+1} h_{n+1} + F_n h_n^F - V_n H_n - L_n h_n - S_n h_n^S = 0, \quad (6.86)$$

цией y в жидкую с концентрацией x . Тогда уравнения массоотдачи для газовой и жидкой фаз запишутся в виде

$$W_i = \beta_y F (y_i - y_{pi}), \quad (6.78)$$

$$W_i = \beta_x F (x_{pi} - x_i). \quad (6.79)$$

Величина W_i в уравнениях (6.78), (6.79) одна и та же, поскольку весь компонент, переносимый в газовой фазе к поверхности раздела, переходит в жидкую фазу.

Исходя из условия равновесия фаз у поверхности их соприкосновения ($y_p = m x_p$) после преобразований получим

$$W_i = K_y F (y_i - y_i^*), \quad (6.80)$$

где K_y определяется уравнением

$$\frac{1}{K_y} = \frac{1}{\beta_y} + \frac{m}{\beta_x} \quad (6.81)$$

и называется коэффициентом массопередачи, отнесенным к концентрации газа.

Уравнение (6.80) описывает переход вещества из газовой фазы в жидкую и называется уравнением массопередачи. Движущей силой здесь является разность концентраций ($y_i - y_i^*$).

Систему уравнений (6.78), (6.79) можно преобразовать также к виду

$$W_i = K_x F (x^* - x_i), \quad (6.82)$$

где x^* — концентрация жидкости, равновесная с концентрацией газа y ($x^* = y/m$), а движущей силой служит разность концентраций ($x^* - x$).

Величина K_x представляет собой коэффициент массопередачи, отнесенный к концентрации жидкости, и определяется из соотношения

$$\frac{1}{K_x} = \frac{1}{m\beta_y} + \frac{1}{\beta_x}. \quad (6.83)$$

В уравнении (6.81) член $\frac{1}{\beta_y}$ характеризует сопротивление массопередаче, оказываемое газовой фазой, а член m/β_x — сопротивление жидкой фазы. Сумма этих величин $1/K_y$ есть общее сопротивление массопередаче. Таким образом, уравнение (6.81) выражает аддитивность фазовых сопротивлений.

§ 6.5. Ректификация многокомпонентных смесей

Модель ректификационной колонны. Процесс ректификации — один из наиболее распространенных процессов разделения смесей в химической технологии. По определению, процессом ректификации называется терм-

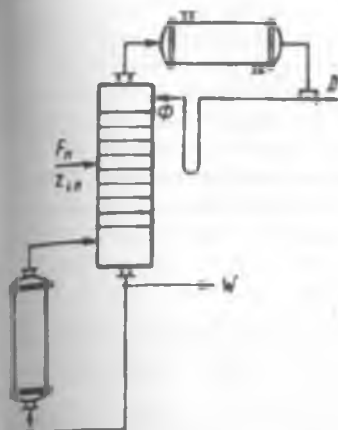


Рис. 6.4. Схема ректификационной установки

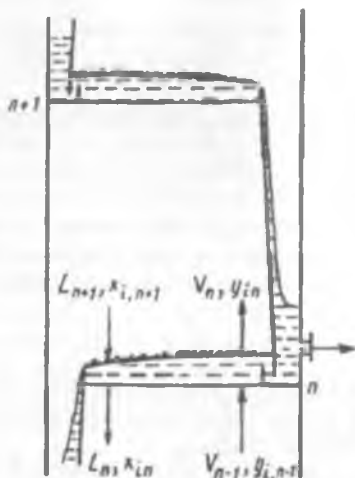


Рис. 6.5. Схема потоков жидкости и пара на тарелке ректификационной колонны

ческий способ разделения смесей путем многократного испарения и конденсации смеси, сопровождающиеся тепло- и массообменом. Таким образом, процесс ректификации включает связанные между собой явления тепло- и массопередачи. Остановимся теперь на математическом описании ректификации. Для определенности будем рассматривать тарельчатую ректификационную колонну, содержащую N тарелок, в которой происходит разделение смеси из M компонентов (рис. 6.4).

Исходное питание в количестве F_n состава z_{in} подается на n -ю тарелку колонны. Сверху колонны отбирается дистиллят в количестве D состава x_{Di} , а снизу колонны — кубовый продукт в количестве W состава x_{wi} .

Модель ректификационной колонны основывается на следующих допущениях: 1) паровая фаза принимается идеальной; 2) жидкость на тарелке полностью перемешана.

Схема потоков на тарелках колонны изображена на рис. 6.5.

Математическое описание включает следующие уравнения:

общего материального баланса на тарелках колонны

$$V_{n-1} + L_{n+1} + F_n - V_n - L_n - S_n = 0, \quad (6.84)$$

покомпонентного материального баланса

$$V_{n-1} y_{i,n-1} + L_{n+1} x_{i,n+1} + F_n z_{in} - V_n y_{i,n} - L_n x_{i,n} - S_n x_{in} = 0, \quad (6.85)$$

теплового баланса

$$V_{n-1} H_{n-1} + L_{n+1} h_{n+1} + F_n h_n^F - V_n H_n - L_n h_n - S_n h_n^S = 0, \quad (6.86)$$

фазового равновесия

$$y_{in}^* = K_{in} x_{in}, \quad (6.87)$$

а также стехиометрические соотношения

$$\sum_{i=1}^M y_{in} = 1, \quad \sum_{i=1}^M x_{in} = 1. \quad (6.88)$$

Здесь x, y, z — составы жидкости, пара и внешнего потока. Если на тарелках колонны не достигается равновесие, то состав покидающего тарелку пара определяется через эффективность тарелки в виде

$$(y) = (y_{n-1}) + [E_T] (y^* - y_{n-1}), \quad (6.89)$$

где (y_{n-1}) — вектор состава пара, поступающего на тарелку; (y^*) — вектор равновесных составов пара над n -й тарелкой; $[E_T]$ — матрица эффективностей тарелки.

Вид матрицы эффективной $[E_T]$ зависит от структуры потока жидкости на тарелке, и в случае идеального вытеснения имеем

$$[E_T] = \frac{L}{V} \left(\exp \left\{ \frac{V}{L} [E_1] [m] \right\} - [I] \right) [m]^{-1}, \quad (6.90)$$

где $[E_1]$ — матрица локальной эффективности; $[m]$ — матрица линейной аппроксимации равновесной зависимости $y(x) - y(x^0) = [m(x^0)] (x - x^0)$. В уравнении (6.86) H и h — соответственно энтальпии пара и жидкости, определяемые выражениями

$$H = \sum_{j=1}^M y_j H_j^0, \quad (6.91)$$

$$h = \sum_{j=1}^M x_j H_j^0. \quad (6.92)$$

При расчете равновесия жидкость — пар отклонение от идеальности жидкой фазы учитывается с помощью коэффициента активности γ , определяемого как функция состава и температуры по уравнению NRTL, либо по другому подходящему уравнению.

Раскрывая константу равновесия K_{in} , уравнение (6.87) можно переписать в виде

$$y_i = \frac{\gamma_i x_i P_i^0(T)}{P}, \quad (6.93)$$

где $P_i^0(T)$ — давление паров чистого i -го компонента в зависимости от температуры, определяемое из уравнения

$$\ln P_i^0(T) = A_1 + \frac{A_2}{T} + A_3 T + A_4 \ln(T). \quad (6.94)$$

Здесь P_i^0 выражено в атмосферах (1 атм = 101 325 Па), T — в кельвинах.

Система уравнений (6.84)–(6.94) представляет собой математическое

описании процесса ректификации в тарельчатой колонне. Она нелинейна, поэтому для ее решения необходимо использовать итерационные методы (на методах решения остановимся ниже).

Для принятого математического описания процесс моделирования заключается в решении системы уравнений при заданной совокупности внешних условий. Обычно различают два типа внешних условий.

1) *Внешние условия для решения задачи в проверочной постановке* (расчет режимов работы колонны заданной конструкции). Здесь в качестве внешних условий принимаются: а) состав и количество питания; б) конструктивные параметры — диаметр колонны, число тарелок, межтарельчатое расстояние. В результате решения проверочной задачи определяют: оптимальные флегмовое число и место ввода питания, состав продуктов разделения и профили концентраций и температур по колонне.

2) *Внешние условия для решения проектной задачи*. При такой постановке задачи внешними условиями являются: а) количество и состав разделяемой смеси; б) содержание примесей в целевом продукте.

Таким образом, проектная задача является более общей и включает в себя проверочную. В результате решения проектной задачи определяют: число тарелок в колонне; флегмовое число и тарелку ввода питания, соответствующие минимуму приведенных затрат и обеспечивающие выделение целевого продукта заданного качества; диаметр колонны; межтарельчатое расстояние; тип тарелок и проверку их работоспособности; толщину обечайки колонны; расход пара и жидкости в укрепляющей и исчерпывающей частях колонны; тепловую нагрузку на кипятильник и дефлегматор колонны; состав продуктов разделения; экономическую оценку проекта с указанием величины приведенных затрат, эксплуатационных и капитальных затрат; стоимости греющего пара и охлаждающей воды.

Диаметр колонны D находят по формуле:

$$D = \sqrt{\frac{4V}{\pi W_{\max}}} \quad (6.95)$$

где

$$W_{\max} = C_{\max} \sqrt{\frac{\rho_{\text{ж}} - \rho_{\text{п}}}{\rho_{\text{п}}}} \quad (6.96)$$

$$C_{\max} = 8,47 \cdot 10^{-5} [K_1 C_1 - C_2 (\lambda - 35)] \quad (6.97)$$

$$\lambda = \frac{0,65L}{\rho_{\text{ж}}} \sqrt{\frac{K_1 C_1}{V}} \sqrt{\frac{\rho_{\text{ж}} - \rho_{\text{п}}}{\rho_{\text{п}}}} \quad (6.98)$$

В зависимости от рассчитанного диаметра определяется межтарельчатое расстояние ΔH :

если	$D \leq 0,8$, то	$\Delta H = 0,20$ м;
"	$0,8 < D \leq 1,6$, "	$\Delta H = 0,35$;
"	$1,6 < D \leq 2,0$, "	$\Delta H = 0,40$;
"	$2,0 < D \leq 2,4$, "	$\Delta H = 0,50$;
"	$2,4 < D \leq 3,0$, "	$\Delta H = 0,75$;
"	$3,0 < D$, "	$\Delta H = 0,75$.

(6.99)

Далее для выбранного типа тарелок осуществляют проверку их работоспособности при рассчитанных диаметре и межтарельчатом расстоянии, т.е. определяют величину уноса жидкости паром:

$$e = \frac{A (0.052 h_{\sigma} - 1.72)}{H^{\beta} \psi^2} \left(\frac{\omega}{\epsilon_{эф} m} \right)^{3.7}, \quad (6.100)$$

где h_{σ} — глубина барботажа; m — коэффициент; $\psi = 0,9$; β , A — коэффициенты; ω — скорость пара; H — межтарельчатое расстояние; $\epsilon_{эф}$ — эффективная рабочая площадь тарелки.

Время пребывания жидкости в переливном устройстве составляет

$$\tau = \frac{3600 V_{пер}}{B L_V}, \quad \tau_{доп} = 8 - 6 \frac{h'}{H}, \quad (6.101)$$

а величина вылета струй жидкости в переливном устройстве есть

$$Y = (4,5 \frac{L_V}{\Delta h} - 0,36) \sqrt{\frac{2}{g} (H + h_n + 1,7 \Delta h - h')}. \quad (6.102)$$

В уравнениях (6.101), (6.102) B — длина сливной планки; L_V — расход жидкости на единицу длины сливной планки; $V_{пер}$ — объем перелива; h' — высота жидкости в переливном устройстве; h_n — высота переливной планки; Δh — высота подпора жидкости над переливом.

Толщину стенки обечайки колонны S рассчитывают в зависимости от диаметра колонны D , давления в колонне P и максимальной температуры $T_{куба}$ по формуле

$$S = DP / (296,8 - 0,1866(T_{куба} - 273,2)). \quad (6.103)$$

По данным составов дистиллята и кубового продукта, а также потоков пара с верха колонны и кубового отбора определяются тепловые нагрузки на кипятильник Q_K и дефлегматор Q_D :

$$Q_K = \left(\sum_{i=1}^M r_{исп,i}^0 x_{wi} \right) V_1, \quad (6.104)$$

$$Q_D = \left(\sum_{i=1}^M r_i^0 y_{Ni} \right) V_N. \quad (6.105)$$

где r_i^0 — теплота испарения чистого i -го компонента; x_w — состав кубового продукта; y_N — состав пара с верха колонны.

Исходя из тепловых нагрузок на кипятильник и дефлегматор, рассчитывают требуемые расходы греющего пара и охлаждающей воды.

Положение места ввода питания уточняют с помощью условия Джилланда

$$\left(\frac{x_{\text{ЛК}}}{x_{\text{ТК}}} \right)^{f-1} < \left(\frac{x_{\text{ЛК}}}{x_{\text{ТК}}} \right)^f < \left(\frac{x_{\text{ЛК}}}{x_{\text{ТК}}} \right)^{f+1}, \quad (6.106)$$

где $x_{\text{ЛК}}$ и $x_{\text{ТК}}$ — соответственно концентрации легкого и тяжелого ключевых компонентов.

Для оценки капитальных затрат на колонну по эмпирическим соотношениям рассчитывают вес отдельных элементов колонны, а затем вес всей колонны.

Используя стоимость 1 т колонны $\Pi_{\text{Г}}$ и стоимость монтажных работ $\Pi_{\text{м}}$ в зависимости от общего веса колонны, находят капитальные затраты на колонну:

$$K_{\text{руб}} = \Pi_{\text{Г}} G_{\text{кг}}^{(0)} / 1000 + \Pi_{\text{м}} \quad (6.107)$$

Оценку эксплуатационных затрат проводят по двум основным статьям: затратам на греющий пар и затратам на охлаждающую воду. Если стоимость греющего пара составляет $\Pi_{\text{п}}$, а охлаждающей воды $\Pi_{\text{в}}$ и ректификационная колонна работает T часов в год, то эксплуатационные затраты ЭЗ составят

$$\text{ЭЗ} = G_{\text{гр.п}} T \Pi_{\text{п}} + G_{\text{охл.в}} T \Pi_{\text{в}}. \quad (6.108)$$

где $G_{\text{гр.п}}$ и $G_{\text{охл.в}}$ — требуемые расходы греющего пара и охлаждающей воды за 1 ч.

Наконец, приведенные затраты Пр.З определяют по формуле

$$\text{Пр.З} = \text{ЭЗ} + 0,15 K_{\text{З}}. \quad (6.109)$$

Математическое описание кипятильника и дефлегматора. Математическое описание этих элементов обычно может строиться на основе гораздо более приближенных моделей, чем математическое описание колонны, поскольку удельный вес разделительной способности этих элементов относительно мал по сравнению с разделительной способностью, достигаемой установкой в целом.

Кипятильник. В качестве гидродинамической модели кипятильника колонны обычно принимают модель идеального смешения. Это допущение, как правило, оправдано для большинства типов кипятильников вследствие интенсивного перемешивания, происходящего в объеме жидкости при ее кипении.

В соответствии со способом получения пара в ректификационных колоннах можно выделить следующие типы кипятильников: 1) парциальные; 2) полного испарения; 3) промежуточного типа; 4) с подводом острого пара.

Первые три типа представляют собой разновидности кипятильников, принцип работы которых основан на подводе теплоты с помощью специальных обогревателей, выполняемых обычно в виде обогреваемых рубашек, эмеевиков, экранов и т.д.

Четвертый тип кипятильников — с подводом острого пара — дает наиболее экономичное решение проблемы получения пара в колонне, поскольку при этом отсутствует необходимость в специальных обогревателях, имеющих определенную поверхность, и, кроме того, отсутствуют теплопотери с отработанным теплоносителем.

П а р ц и а л ь н ы й к и п я т и л ь н и к. Математическое описание кипятильников этого типа представляет собой систему балансовых уравнений, записанных для каждого компонента разделяемой смеси:

$$L_1 x_j^{(1)} - L_0 x_j^{(0)} - V_0 y_j^{(0)} = 0, \quad j = 1, \dots, k; \quad (6.110)$$

кроме того, в нее входят уравнение теплового баланса

$$L_1 h^{(1)} - L_0 h_0 - V_0 H_0 + Q = 0 \quad (6.111)$$

и уравнение общего материального баланса

$$L_1 - L_0 - V_0 = 0. \quad (6.112)$$

Состав отходящего пара определяется как равновесный составу жидкости в кипятильнике и находится на основании соотношений, справедливых для расчета равновесия:

$$y_j^{(0)} = K_j^{(0)} (x_j^{(0)} / T) x_j^{(0)}, \quad j = 1, \dots, k. \quad (6.113)$$

Кипятильник полного испарения. Описание кипятильников этого типа отличается от описания парциальных кипятильников лишь способом определения состава пара, который в данном случае считается равным составу жидкости:

$$y_j^{(0)} = x_j^{(0)}. \quad (6.114)$$

Кипятильник полного испарения не обладает разделительной способностью и состав уходящей из него жидкости равен составу поступающей.

Кипятильник промежуточного типа. К кипятильникам промежуточного типа относятся практически все реальные кипятильники ректификационных колонн, несмотря на то, что они конструктивно выполняются как один из рассмотренных выше типов, например из-за неидеальности смешения жидкости в кубовой емкости или неполноты испарения. В подобных случаях иногда целесообразно использовать математическое описание кипятильника промежуточного типа, для которого состав уходящего пара определяется соотношением

$$y_j^{(0)} = \eta y_{pj}^{(0)} + (1 - \eta) x_j^{(0)}, \quad j = 1, \dots, k, \quad (6.115)$$

где $\eta^{(0)}$ — эффективность разделения кипятильника.

Для парциальных кипятильников величина $\eta^{(0)}$ близка к единице, а

для кипятильников полного испарения — к нулю. Неидеальность работы кипятильника учитывается значением $\eta^{(0)}$. Нетрудно видеть, что кипятильник промежуточного типа, для которого состав уходящего пара определяется соотношением (6.115), как частные случаи включает кипятильник полного испарения ($\eta^{(0)} = 0$) и парциальный кипятильник ($\eta^{(0)} = 1$).

К и п я т и л ь н и к с п о д в о д о м о с т р о г о п а р а . Обычно глубина барботаж в кипятильниках этого типа выбирается так, чтобы уходящий пар находился в равновесии с жидкостью. Математическое описание при этом включает систему балансовых уравнений для каждого компонента разделяемой смеси:

$$L_1 x_j^{(1)} - L_0 x_j^{(0)} - V_0 y_j^{(0)} = 0, \quad j = 1, \dots, k; \quad j \neq l, \quad (6.116)$$

$$L_1 x_l^{(1)} - L_0 x_l^{(0)} - V_0 y_l^{(0)} + V_d y_{dl} = 0; \quad (y_{dl} = 1), \quad (6.117)$$

где уравнение (6.117) определяет баланс по l -му компоненту, острый пар которого используется для обогрева куба. При наличии в остром паре нескольких компонентов число уравнений типа (6.117) увеличивается и соответственно определяются концентрации компонентов в остром паре.

Кроме системы уравнений (6.116), (6.117) в математическое описание включаются уравнение общего теплового баланса

$$L_1 h_1 - L_0 h_0 - V_0 H_0 + V_d H_d = 0 \quad (6.118)$$

и уравнение общего материального баланса

$$L_1 - L_0 - V_0 + V_d = 0, \quad (6.119)$$

а также уравнения, определяющие состав уходящего пара, в качестве которых для равновесного отходящего пара принимаются уравнения (6.113). Если же отходящий пар не находится в равновесии с кубовой жидкостью (например, глубина барботаж мала), то разделительная способность кипятильника должна рассчитываться как и для тарелки колонны.

К о н д е н с а т о р . Назначением конденсатора является, с одной стороны, получение флегмы для орошения колонны, а с другой — конденсация паров получаемого продукта (дистиллята). Разделение этих функций приводит к схемам ректификации с так называемыми парциальными конденсаторами (дефлегматорами), в которых происходит неполная конденсация паров, отводимых сверху колонны, за счет чего достигается дополнительное обогащение продукта легкими компонентами. Конденсация паров продукта (дистиллята) при этом производится в дополнительном конденсаторе, режим которого задается таким образом, чтобы по возможности полностью сконденсировать пары продукта, уходящие из дефлегматора. Достоинством таких схем является то, что флегмирование колонны может обеспечиваться с использованием более высокотемпературного (а следовательно, и более дешевого) хладагента, в то время как низкотемпературный (а следовательно, и более дорогой) хладагент необходим

лишь для конденсации относительно небольшого количества конечного продукта.

Гидродинамика конденсаторов, как правило, весьма сложна для точного описания. Однако для целей моделирования ректификационных установок обычно достаточно рассматривать конденсатор как обычный аппарат с полным перемешиванием.

Полный конденсатор. Поскольку в полном конденсаторе происходит конденсация всего количества пара, отводимого сверху колонны, получаемый дистиллят, а также и флегма имеют тот же состав, что и конденсируемые пары. Поэтому вместо уравнений покомпонентных балансов, обычно используемых для описания большинства элементов ректификационной установки, в описании полного конденсатора принимаются условия равенства концентраций:

$$y_j^{(N)} = x_j^{(N+1)} = y_j^{(N+1)}, \quad j = 1, \dots, k. \quad (6.120)$$

Отличительной особенностью полного конденсатора является то, что температура получаемой флегмы обычно не соответствует температуре ее кипения, так как для надежной конденсации всего количества пара необходимо несколько завышенное охлаждение. Поэтому основной задачей расчета полного конденсатора обычно является определение теплосодержания флегмы, подаваемой на орошение колонны, для чего используется уравнение теплового баланса конденсатора, имеющее вид

$$V_N H_N - (L_{N+1} + V_{N+1}) h_{N+1}^* - Q_{N+1} = 0. \quad (6.121)$$

Иногда в практических расчетах теплосодержание флегмы задается ее температурой t_{N+1} ; тогда уравнение (6.121) служит для определения количества теплоты, которое необходимо отобрать из конденсатора для обеспечения заданного режима его работы.

В дополнение к уравнениям (6.120) и (6.121) рассматривается также уравнение общего материального баланса конденсатора:

$$V_N - L_{N+1} - V_{N+1} = 0. \quad (6.122)$$

Парциальный конденсатор. В отличие от полного парциальный конденсатор обладает разделительной способностью, которая обычно учитывается тем, что состав получаемой флегмы полагается равновесным составу неконденсированного пара. Математическое описание парциального конденсатора при этом содержит уравнения балансов для всех компонентов:

$$V_N y_j^{(N)} - L_{N+1} x_j^{(N+1)} - V_{N+1} y_j^{(N+1)} = 0, \quad j = 1, \dots, k, \quad (6.123)$$

уравнение теплового баланса

$$V_N H_N - L_{N+1} h_{N+1} - V_{N+1} H_{N+1} - Q_{N+1} = 0, \quad (6.124)$$

уравнение общего материального баланса

$$V_N - L_{N+1} - V_{N+1} = 0, \quad (6.125)$$

а также условия равновесия

$$y_j^{(N+1)} = y_j^{(N+1)}. \quad (6.126)$$

Для парциального конденсатора температура флегмы, подаваемой на орошение колонны, обычно предполагается равной температуре ее кипения и ее теплосодержание определяется исходя из состава сконденсированной жидкости.

При математическом моделировании удобно представить описание полного и парциального конденсатора в единой форме. С этой целью используется более общее выражение для расчета состава дистиллята:

$$y_j^{(N+1)} = (1 - \eta^{(N+1)}) y_j^{(N)} + \eta^{(N+1)} y_j^{(N+1)}, \quad (6.127)$$

где $\eta^{(N+1)}$ — эффективность разделения, определяемая как $\eta^{(N+1)} = 0$ для полного конденсатора и как $\eta^{(N+1)} = 1$ для парциального. Охлаждение флегмы ниже температуры ее кипения для полного конденсатора при этом задается дополнительно.

Связь локальной эффективности массопередачи с коэффициентом массопередачи. Для характеристики интенсивности массообмена в элементе массообменного пространства введем понятие локальной эффективности η_n , которое определим в следующем виде:

$$\eta_n = \frac{y^{(i)} - y^{(i-1)}}{y_p - y^{(i-1)}}, \quad (6.128)$$

где $y^{(i-1)}$ — состав фазы, поступающей в массообменный элемент; $y^{(i)}$ — состав фазы, покидающей массообменный элемент; y_p — равновесный состав фазы.

Из определения локальной эффективности ясно, что данная величина характеризует степень достижения равновесия в массообменном элементе. При большой скорости массопередачи (коэффициент массопередачи стремится к бесконечности) концентрация фазы $y^{(i)}$ на выходе будет стремиться к равновесной y_p ($y^{(i)} \rightarrow y_p$) и локальная эффективность массопередачи будет стремиться к единице. Наоборот, при убывающей скорости массопередачи (коэффициент массопередачи стремится к нулю) концентрация фазы на выходе $y^{(i)}$ будет стремиться к входной концентрации $y^{(i-1)}$ и локальная эффективность массопередачи будет стремиться к нулю. Таким образом, локальная эффективность является прямой характеристикой скорости массопередачи в элементарном объеме массообменного пространства.

Рассмотрим теперь связь локальной эффективности η_n с объемным коэффициентом массопередачи K_{0y} . Для простоты будем рассматривать двухкомпонентную смесь. Пусть массообмен протекает в системе жидкость — пар, причем жидкость движется в направлении оси z , а пар — в на-

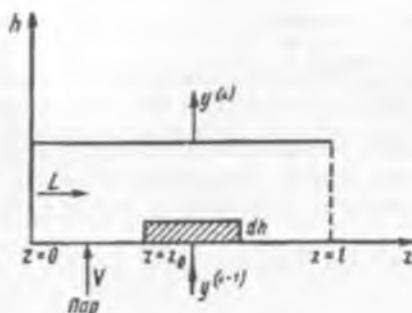


Рис. 6.6. Схема потоков в массообменном пространстве: L — поток жидкости; V — поток пара

правлении оси h (массообменный элемент тарелки ректификационной колонны). На рис. 6.6 приведена схема потоков в такой системе.

Рассмотрим элемент массообменного пространства в сечении $z = z_0$ высотой dh . Будем предполагать, что пар движется в массообменном пространстве в режиме идеального вытеснения. Тогда для рассматриваемого элемента единичного сечения и высотой dh можно записать следующее уравнение сохранения массы:

$$\frac{V}{S} \frac{dy}{dh} = K_{0y} a (y_p - y). \quad (6.129)$$

В уравнении (6.129) S — площадь поверхности, через которую проходит поток V ; $K_{0y} a$ — объемный коэффициент массопередачи.

Разделим переменные в уравнении (6.129) и проинтегрируем его в пределах от $y^{(i-1)}$ до $y^{(i)}$:

$$\frac{dy}{y_p - y} = \frac{K_{0y} a}{v} dh, \quad (6.130)$$

$$\ln \frac{y^{(i)} - y_p}{y^{(i-1)} - y_p} = - \frac{K_{0y} a h}{v} \quad (6.131)$$

или

$$y^{(i)} - y_p = (y^{(i-1)} - y_p) e^{-\frac{K_{0y} a h}{v}}. \quad (6.132)$$

В уравнениях (6.130)–(6.132) v — скорость движения парового потока. Приведем левую часть уравнения (6.132) к виду

$$(y^{(i)} - y^{(i-1)}) + (y^{(i-1)} - y_p) = (y^{(i-1)} - y_p) e^{-\frac{K_{0y} a h}{v}}. \quad (6.133)$$

Тогда, разделив уравнение (6.133) на $(y_p - y^{(i-1)})$ и учитывая, что $\eta_n = (y^{(n)} - y^{(i-1)}) / (y_p - y^{(i-1)})$, получим уравнение связи локальной эффективности η_n с коэффициентом массопередачи $K_{Oy} a$:

$$\eta_n = 1 - e^{-\frac{K_{Oy} a h}{u}} \quad (6.134)$$

Величину

$$N_{Oy} = \int_{y^{(i-1)}}^{y^{(n)}} \frac{dy}{y_p - y} = \frac{K_{Oy} a h}{u} \quad (6.135)$$

часто называют *числом единиц переноса*. В этом случае уравнение (6.135) приводится к виду

$$\eta_n = 1 - e^{-N_{Oy}} \quad (6.136)$$

Оценка эффективности массопередачи на тарелках ректификационных колонн. Аналогично локальной эффективности для оценки массопередачи на всем массообменном устройстве (тарелке ректификационной колонны) вводится понятие эффективности тарелки (иногда называемой коэффициентом полезного действия тарелки по Мэрфи), определяемой в виде

$$\eta_T = \frac{y^{(i)} - y^{(i-1)}}{y_p - y^{(i-1)}} \quad (6.137)$$

В выражении (6.137) $y^{(i)}$ — средний состав пара, покидающего i -ю тарелку; $y^{(i-1)}$ — состав пара, поступающего на i -ю тарелку; y_p — равновесный состав пара. На рис. 6.7. показана схема потоков пара и жидкости на тарелке колонны.

Так же как и локальная эффективность, величина η_T характеризует степень достижения равновесия на тарелке. Однако в отличие от локальной эффективности эффективность тарелки η_T уже зависит не только от коэффициента массопередачи, но и от структуры потоков в массообменном пространстве. Очевидно, что в зависимости от структуры потоков пара V и жидкости L будут существовать различные локальные составы жидкости $x^{(1)}, \dots, (n)/x^{(i)}$ и соответствующие составы пара $y^{(1)}, \dots, (n)/y^{(i)}$ (рис. 6.7). Соответственно будет меняться и общий состав пара, покидающего тарелку $y^{(i)}$. Найдём теперь выражения для эффективности тарелки η_T как

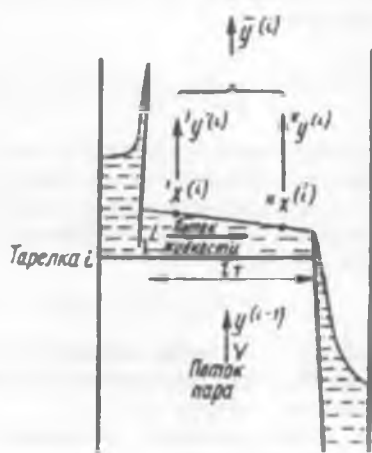


Рис. 6.7. Схема потоков пара и жидкости на тарелке колонны

функции коэффициента массопередачи и расходов фаз для различной структуры потока пара и жидкости на тарелке.

Модель движения пара в массообменном пространстве. В подавляющем большинстве практически используемых математических описаний разделительной способности тарелок для характеристики движения парового потока в массообменном пространстве тарелки используется модель идеального вытеснения.

Основное уравнение этой модели имеет вид

$$\frac{\delta V}{\delta S_T} \frac{dy_j^{(j)}}{dh} - g_n^{(j)} = 0, \quad j = 1, \dots, M-1, \quad (6.138)$$

где $\frac{\delta V}{\delta S_T}$ — функция распределения парового потока по площади массообменного пространства тарелки, удовлетворяющая условию

$$\int_0^{l_T} \int_0^{b_T} \frac{\delta V}{\delta S_T} db dl = V, \quad (6.139)$$

а $\vec{q}_n^{(j)}$ — вектор локальных скоростей массопередачи, связанный с матрицей объемных коэффициентов массопередачи $[K_{0y}a]$ соотношением

$$\vec{g}_n^{(j)} = [K_{0y}a] (\vec{y}_p - y^{(j)}). \quad (6.140)$$

Уравнение (6.138) нужно проинтегрировать при граничном условии

$$y_j^{(j)}(0) = y_j^{(j-1)}, \quad j = 1, \dots, M-1. \quad (6.141)$$

При записи уравнения (6.138) в интегральной форме получается соотношение

$$\frac{\delta V}{\delta S_T} (y_j^{(j)} - y_j^{(j-1)}) = \int_0^{h_T} g_n^{(j)} dh, \quad (6.142)$$

определяющее локальный состав пара, покидающего массообменное пространство тарелки с рассматриваемой элементарной площадью барботажа δS_T .

Полное перемешивание жидкости на тарелке. Запишем уравнение материального баланса для i -й тарелки ректификационной колонны:

$$L(x^{(i+1)} - x^{(i)}) = V(\bar{y}^{(i)} - y^{(i-1)}), \quad (6.143)$$

где $x^{(i+1)}$ — состав жидкости, стекающей с $(i+1)$ -й тарелки; $y^{(i-1)}$ — состав пара, поступающего на i -ю тарелку; $\bar{y}^{(i)}$ — средний состав пара, покидающего i -ю тарелку.

Введя величину эффективности тарелки η_T , уравнение (6.143) можно переписать в виде

$$L(x^{(i+1)} - x^{(i)}) = V\eta_T(y_p - y^{(i-1)}). \quad (6.144)$$

В соответствии с моделью идеального перемешивания состав жидкости во всех точках массообменного пространства одинаков и, следовательно, средний состав пара $\bar{y}^{(i)}$ должен быть равен локальному составу $y^{(i)}$, т.е.

$$\bar{y}^{(i)} = y^{(i)}. \quad (6.145)$$

Тогда из уравнений (6.143) – (6.145) следует, что

$$\eta_T = \frac{y^{(i)} - y^{(i-1)}}{y_p - y^{(i-1)}} \quad (6.146)$$

или

$$\eta_T = \eta_n. \quad (6.147)$$

Таким образом, при идеальном перемешивании жидкости на тарелке эффективность тарелки (к.п.д. по Мэрфри) равна локальной эффективности массопередачи.

Идеальное вытеснение жидкости на тарелке.

Уравнение идеального вытеснения жидкости на тарелке имеет вид

$$L \frac{dx^{(i)}}{dl} = \frac{V}{l_T} (y^{(i)} - y^{(i-1)}) = - \frac{V}{l_T} \eta_n (y_p - y^{(i-1)}), \quad (6.148)$$

где l – текущая координата вдоль потока жидкости; l_T – длина пути жидкости на тарелке.

Обозначим состав жидкости на выходе с i -й тарелки через $\hat{x}^{(i)}$ и будем считать, что в пределах тарелки равновесный состав пара может аппроксимироваться линейной зависимостью

$$y_p = mx + b. \quad (6.149)$$

Тогда уравнение (6.148) примет вид

$$L \frac{dx^{(i)}}{dl} = - \frac{V}{l_T} \eta_n (y_p (\hat{x}^{(i)} + m(x^{(i)} - \hat{x}^{(i)})) - y^{(i-1)}) \quad (6.150)$$

или

$$\frac{d(x^{(i)} - \hat{x}^{(i)})}{dl} + \frac{V \eta_n m}{L l_T} (x^{(i)} - \hat{x}^{(i)}) + \frac{V \eta_n}{L l_T} (y_p (\hat{x}^{(i)} - y^{(i-1)})) = 0. \quad (6.151)$$

Введем обозначения

$$A = \frac{V \eta_n m}{L l_T}, \quad (6.152)$$

$$B = \frac{V \eta_n}{L l_T} (y_p (\hat{x}^{(i)} - y^{(i-1)})). \quad (6.153)$$

Тогда уравнение (6.151) переписывается в виде

$$\frac{d(x^{(i)} - \hat{x}^{(i)})}{dl} + A(x^{(i)} - \hat{x}^{(i)}) + B = 0. \quad (6.154)$$

Решим линейное неоднородное уравнение (6.154) относительно искомой переменной $(x^{(i)} - \hat{x}^{(i)})$. Для этого сначала найдем решение соответствующего однородного уравнения

$$x^{(i)} - \hat{x}^{(i)} = u(l)e^{-Al} \quad (6.155)$$

и, подставив его в исходное неоднородное уравнение (6.154), определим вид множителя $u(l)$:

$$u(l) = -\frac{B}{A} e^{Al} + C_1. \quad (6.156)$$

Тогда решение неоднородного уравнения запишется в виде

$$x^{(i)} - \hat{x}^{(i)} = \left[-\frac{B}{A} e^{Al} + C_1\right] e^{-Al} = C_1 e^{-Al} - \frac{B}{A}. \quad (6.157)$$

Используя граничное условие на входе потока жидкости на тарелку, имеющее вид

$$x^{(i)} = x^{(i+1)} \quad \text{при } l = 0, \quad (6.158)$$

найдем константу C_1 :

$$C_1 = x^{(i+1)} - \hat{x}^{(i)} + \frac{B}{A}. \quad (6.159)$$

Тогда решение уравнения (6.154) есть

$$x^{(i)} - \hat{x}^{(i)} = \left(x^{(i+1)} - \hat{x}^{(i)} + \frac{B}{A}\right) e^{-Al} - \frac{B}{A}. \quad (6.160)$$

Рассмотрим теперь решение (6.160) в точке $l = l_r$ ($x^{(i)} = \hat{x}^{(i)}$):

$$\left(x^{(i+1)} - \hat{x}^{(i)} + \frac{B}{A}\right) e^{-Al_r} - \frac{B}{A} = 0. \quad (6.161)$$

Отсюда найдем изменение концентрации в жидкости на тарелке:

$$x^{(i+1)} - \hat{x}^{(i)} = \frac{B}{A} (e^{Al_r} - 1). \quad (6.162)$$

Подставляя в уравнение материального баланса на тарелке ректификационной колонны

$$L(x^{(i+1)} - \hat{x}^{(i)}) = V(\bar{y}^{(i)} - y^{(i-1)}) \quad (6.163)$$

выражение (6.162), имеем

$$(\bar{y}^{(i)} - y^{(i-1)}) = \frac{L}{V} (e^{Al_r} - 1) \frac{B}{A} = \frac{L}{V} \left(e^{\frac{Vm\eta_R}{L}} - 1\right) \left(\frac{y_R - y^{(i-1)}}{m}\right). \quad (6.164)$$

Из последнего уравнения получаем выражение для эффективности тарелки

$$\eta_T = \frac{\bar{y}^{(l)} - y^{(l-1)}}{y_D - y^{(l-1)}} = \frac{L}{V} \left(e^{\frac{V \eta_{nm}}{L}} - 1 \right) \frac{1}{m}. \quad (6.165)$$

Выражение (6.165) справедливо для двухкомпонентных смесей. В случае многокомпонентных смесей имеем аналогичное соотношение

$$[\eta_T] = \frac{L}{V} \left\{ \exp\left(\frac{V}{L} [\eta_n] [m]\right) - [I] \right\} [m]^{-1}, \quad (6.166)$$

где $[\eta_T]$ — матрица эффективностей тарелки; $[\eta_n]$ — матрица локальных эффективностей; $[m]$ — матрица тангенсов углов наклона равновесных зависимостей; $[I]$ — единичная матрица.

Ячеечная модель движения жидкости на тарелке. В соответствии с ячейечной моделью вся длина потока жидкости на тарелке разбивается на n ячеек идеального перемешивания (рис. 6.8).

Запишем уравнение материального баланса для каждой из ячеек:
первая ячейка

$$L(x^{(i+1)} - x_1^{(i)}) = \frac{V}{n} (y_1^{(i)} - y^{(i-1)}), \quad (6.167)$$

вторая ячейка

$$L(x_2^{(i)} - x_2^{(i-1)}) = \frac{V}{n} (y_2^{(i)} - y^{(i-1)}), \quad (6.168)$$

n -я ячейка

$$L(x_{n-1}^{(i)} - x_n^{(i)}) = \frac{V}{n} (y_n^{(i)} - y^{(i-1)}), \quad (6.169)$$

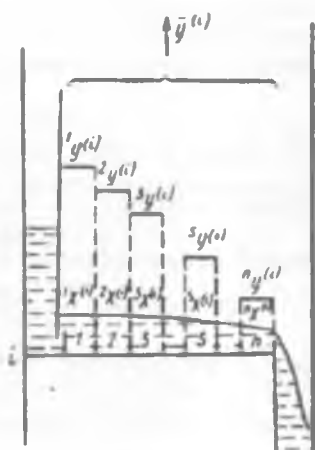


Рис. 6.8. Ячеечная структура потока жидкости на тарелке

Решая систему уравнений (6.167)–(6.169) относительно изменения концентрации жидкости на тарелке и используя общее уравнение материального баланса на тарелке (6.163), получаем следующее выражение для эффективности тарелки:

$$\eta_T = \frac{L}{V} \left[\left(1 + \frac{V}{nL} \eta_n m \right)^n - 1 \right] \frac{1}{m}. \quad (6.170)$$

Соответственно для многокомпонентного случая имеем

$$[\eta_T] = \frac{L}{V} \left\{ [I] + \frac{V}{nL} [\eta_n] [m]^{n-1} [I] \right\} [m]^{-1}. \quad (6.171)$$

Диффузионная модель движения жидкости на тарелке. Уравнение диффузионной модели для i -й тарелки имеет вид

$$\frac{L}{\rho_{ж} F} \frac{dx^{(i)}}{dl} = D_l \frac{d^2 x^{(i)}}{dl^2} - \frac{V}{l_T \rho_{ж} F} (y^{(i)} - y^{(i-1)}), \quad (6.172)$$

а граничные условия таковы:

$$u(x^{(i)} - x^{(i+1)}) = D_l \frac{dx^{(i)}}{dl} \quad \text{при } l = 0, \quad (6.173)$$

$$\frac{dx^{(i)}}{dl} = 0 \quad \text{при } l = l_T. \quad (6.174)$$

В уравнении (6.172) $\rho_{ж}$ — плотность жидкости; F — площадь сечения потока жидкости на тарелке.

Предположим, что в пределах одной тарелки для равновесного состава пара выполняется линейное соотношение

$$y_p = m x^{(i)} + b. \quad (6.175)$$

Тогда, подставив выражение

$$y^{(i)} - y^{(i-1)} = \eta_n (y_p - y^{(i-1)}) \quad (6.176)$$

в уравнение (6.172) и учитывая (6.175), получаем следующее решение дифференциального уравнения диффузионной модели:

$$\eta_T = \frac{1}{4p\lambda} \left\{ (1+p)^2 \exp\left[\frac{Pe}{2}(p-1)\right] - (1-p)^2 \exp\left[\frac{Pe}{2}(-1-p)\right] - 4p \right\}, \quad (6.177)$$

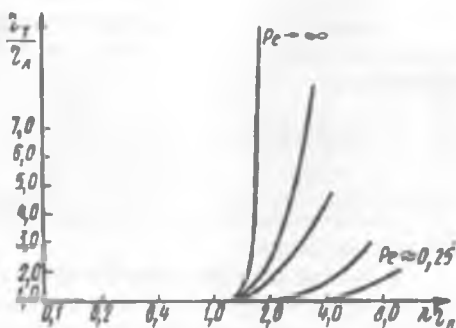
где λ — фактор диффузионного потенциала, равный

$$\lambda = \frac{mV}{L}, \quad (6.178)$$

$$p = \left(1 + \frac{4\lambda}{Pe} \eta_n \right)^{1/2}. \quad (6.179)$$

На рис. 6.9 изображена зависимость отношения эффективностей η_T/η_n от величины $\lambda\eta_n$ для различных чисел Pe . Из нее следует, что при малых

6.9. График зависимости отношения активностей η_T/η_L от величины $\lambda\eta_L$ для различных чисел Pe



числах Pe ($D_1 \rightarrow \infty$, режим смешения жидкости на тарелке) эффективность тарелки η_T по диффузионной модели стремится к значению локальной эффективности η_L . Наоборот, при больших числах Pe ($D_1 \rightarrow 0$, режим вытеснения жидкости на тарелке) эффективность тарелки резко увеличивается по сравнению с локальной эффективностью.

Методы расчета процесса ректификации. Существующие методы расчета процесса можно разделить на две группы, отличающиеся выбором независимых переменных, — составов продуктов разделения и температур на каждой тарелке. К первой группе относится метод расчета "от тарелки к тарелке", ко второй — метод Ньютона, а также метод релаксации. Кроме того, разработаны комбинированные методы, включающие как методы первой группы, так и второй.

Рассмотрим метод Ньютона. Суть его заключается в том, что исходную систему нелинейных уравнений (6.84) — (6.87) линеаризуют и итерационно решают относительно вектора приращений независимых переменных Δx . Новые значения искомых составов жидкости на тарелках определяют из выражения

$$x_n^{s+1} = x_n^s + \Delta x_n, \quad (6.180)$$

где x_n^s — вектор состава жидкости на n -й тарелке; Δx — вектор приращений по составам.

Линеаризация касается системы уравнений покомпонентного баланса (6.85), которая может быть представлена в виде

$$r_{in} = V_{n-1}y_{in-1} + L_{n+1}x_{in+1} + F_n z_{in} - V_n y_{in} - L_n x_{in} - S_n x_{in} \quad (6.181)$$

и проводится с помощью разложения нелинейной функции невязки $r_{in}(x_j)$ в ряд Тейлора:

$$r_{in}^{(k+1)} = r_{in}^{(k)} + \sum_{m=n-1}^{n+1} \sum_{j=1}^M \frac{\partial r_{in}^{(k)}}{\partial x_{jm}} \Delta x_{jm}. \quad (6.182)$$

Таким образом, первоначально заданные составы жидкости x_{in} итерационно уточняют по уравнению (6.180). Расчет заканчивают при выполнении условий:

$$\begin{cases} \Delta x_{in} < \epsilon_1, & 1 \leq i \leq M; \\ r_{in} < \epsilon_2, & 1 \leq n \leq N. \end{cases} \quad (6.183)$$

Алгоритм расчета ректификационной колонны по методу Ньютона состоит в следующем:

1. Задают начальные приближения составов жидкости на всех тарелках (включая куб колонны) x_{in} , температур T_n , составы и количества питаний F_n , а также величины боковых отборов S_n .

2. Определяют состав паровой фазы y_{in} и температуру T_n на всех тарелках колонны (уравнения (6.87), (6.88)).

3. Величины потоков, покидающих тарелки колонны, парового V_n и жидкого L_n уточняют из уравнений теплового баланса (6.86) и общего материального баланса (6.84).

4. Полученные значения потоков и составов на тарелках колонны подставляют в уравнения покомпонентного баланса (6.181) и вычисляют величины невязок r_{in} .

5. Используя линеаризацию (6.182), находят величины приращений по искомым переменным Δx_{in} .

6. По уравнению (6.180) вычисляют новые значения искоемых переменных x_{in}^{i+1} .

7. Осуществляют проверку условий $r_{in} < \epsilon_2$ и $\Delta x_{in} < \epsilon_1$ для всех $1 \leq i \leq M$ и $1 \leq n \leq N$.

Если указанные условия выполняются, то расчет заканчивают. В противном случае расчет продолжают с п. 2.

Метод Ньютона дает быструю сходимость к решению (6–15 итераций), но требует достаточно хорошее начальное приближение. При неудачном начальном приближении составов жидкости на тарелках сходимость может быть не достигнута.

Другим возможным методом решения рассматриваемой задачи является метод релаксации. Здесь также в качестве независимых переменных выбирают составы жидкости на тарелках колонны, но в отличие от метода Ньютона уравнения покомпонентного баланса (6.85) представляют в виде

$$\lambda_n \frac{dx_{in}}{dt} = V_{n-1} y_{in-1} + L_{n+1} x_{in+1} + F_n z_{in} - V_n y_{in} - L_n x_{in} - S_n x_{in} \quad (6.184)$$

или

$$x_{in}^{(k+1)} = x_{in}^{(k)} + \frac{1}{\lambda_n} (V_{n-1} y_{in-1}^{(k)} + L_{n+1} x_{in+1}^{(k)} + F_n z_{in} - V_n y_{in}^{(k)} - L_n x_{in}^{(k)} - S_n x_{in}^{(k)}), \quad (6.185)$$

где $1/\lambda_n$ — параметр релаксации, определяемый выражением

$$\frac{1}{\lambda_{in}} = \frac{(1-T)x_{in}^{(k)}}{m_{in}}, \quad (6.186)$$

Здесь T — фактор релаксации ($0 < T < 1$); m_{in} — максимальный поток, входящий или уходящий со ступени разделения.

Если новое значение концентрации $x_{in}^{(k+1)} < 0$, то производят пересчет по формуле

$$\frac{1}{\lambda_{in}} = \frac{(1-T)x_{in}^{(k)}}{f_{in}}, \quad (6.187)$$

где f_{in} — сумма всех потоков, покидающих ступень разделения.

Уточнение искомых переменных x_{in} ведут по последней итерационной формуле.

Метод релаксации обладает очень хорошей сходимостью к решению, не требует очень большого числа итераций (обычно нескольких десятков). Блок-схема расчета ректификационной колонны методом релаксации приведена на рис. 6.10.

Еще одной модификацией является так называемый метод расчета "от тарелки к тарелке". Здесь уже в качестве независимых переменных выбирают составы продуктов разделения. Суть метода заключается в следующем.

1. Задают состав куба x_{i1} . Из системы нелинейных уравнений материального баланса и равновесия на первой ступени определяют x_{i2} , затем x_{i3} и т. д.

2. Рассчитывают x_{iN} и y_{iN} .

3. По уравнениям покомпонентного баланса для всей колонны корректируют заданные составы x_{i1} :

$$Fx_{if} = Dy_{iN} + Wx_{i1}. \quad (6.188)$$

4. Проверяют выполнение условия $|x_{i1}^{(k+1)} - x_{i1}^{(k)}| < \epsilon$. Если оно выполнено, то расчет заканчивается. В противном случае переходят к п. 1 при $x_{i1}^{(k+1)}$.

Можно использовать также комбинированные методы, которые на определенных стадиях представляют собой сочетания уже рассмотренных

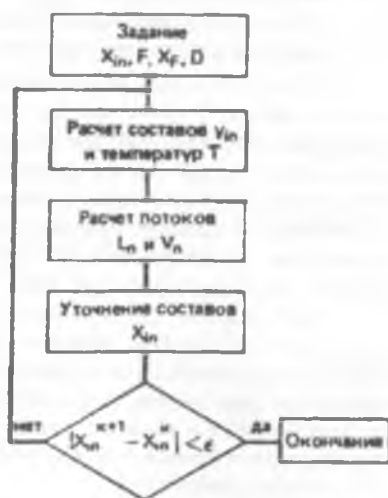


Рис. 6.10. Блок-схема расчета процесса ректификации методом релаксации

методов. Например, можно применить метод релаксации, как более устойчивый, а затем один из методов (Ньютона), обладающий более быстрой сходимостью.

В приложении 8 приведена программа расчета ректификационных колонн DISTLI. Расчет проводится при допущении идеальности поведения паровой и жидкой фаз.

Ректификация в насадочных колоннах. В отличие от тарельчатых колонн в которых контакт жидкости с паром происходит дискретно на тарелках, в насадочных ректификационных колоннах осуществляется непрерывный контакт фаз. Последнее обстоятельство приводит к необходимости использования для математического описания насадочных колонн дифференциальных уравнений, определяющих изменение концентраций компонентов в потоках по колонне.

Для описания структуры потоков в насадке в основном используют три типа моделей — идеального вытеснения, диффузионную и ячеечную. Последние две модели обычно применяют в тех случаях, когда необходимо учесть влияние продольного перемешивания в потоках на разделительную способность колонны.

Движение потоков в насадке отличается сложной гидродинамической структурой взаимодействия потоков, которое существенно зависит от скоростей потоков пара и жидкости. В качестве основного параметра, характеризующего гидродинамическое состояние потоков в насадке, часто используют величину отношения линейной скорости потока пара в колонне к его скорости в режиме инверсии, что позволяет следующим образом классифицировать гидродинамические режимы в насадке:

пеночный режим: $w/w_{инв} < 0,45$;

промежуточный режим: $0,45 < w/w_{инв} < 0,85$;

режим турбулизации: $0,85 < w/w_{инв} < 1,0$.

Следует отметить, что за точкой $w = w_{инв}$ следуют режимы эмульгирования и уноса. С точки зрения эффективности массопередачи режим эмульгирования является наиболее предпочтительным, так как при нем наблюдается резкое возрастание межфазной поверхности. Однако поддержание работы насадочной колонны в данном режиме требует дополнительного регулирования. В данном режиме работают так называемые эмульгационные насадочные колонны, теория которых подробно изложена в книге В.В. Кафарова "Основы массопередачи".

При анализе стационарных режимов работы насадочных колонн в основном исследуется влияние продольного перемешивания на разделительную способность насадочной аппаратуры. Анализ исследований гидродинамики однофазных потоков показывает, что коэффициент продольного перемешивания в газовых потоках ниже, чем в жидкостных и, кроме того, продольное перемешивание в жидкой фазе тем больше, чем меньше линейная скорость жидкости.

С точки зрения математического описания процессов ректификации в насадочных колоннах наибольший интерес представляют данные по продольному перемешиванию в двухфазных потоках и особенно в парожид-

костных системах. Исследования в этой области показали, что в колонне с орошаемой насадкой продольное перемешивание потока жидкости приводит к снижению движущей силы процесса массопередачи.

Математическое описание насадочной колонны состоит из системы уравнений, определяющей распределение концентраций в потоках пара и жидкости по высоте колонны. В зависимости от типа используемых уравнений это может быть либо система конечных уравнений (ячеечная модель), либо система дифференциальных уравнений (модели идеального вытеснения и диффузионная). Поскольку для ячеечной модели получаемые соотношения аналогичны ранее рассмотренным для тарельчатой колонны с ячеечной структурой потока жидкости на тарелке, ниже приводится лишь математическое описание для моделей идеального вытеснения и диффузионной.

В рассматриваемых ниже соотношениях принимается, что межфазный перенос определяется эквивалентным массообменом, описываемым в случае насадочных колонн формулой

$$g = S_k [K_{oy} a] (y_p - y). \quad (6.189)$$

Отметим, что выражение (6.189) относится к единице высоты насадки.

Последующие выводы проводят для случая, когда потоки пара и жидкости постоянны по колонне. Если необходим учет изменения потоков пара и жидкости по высоте, то в систему уравнений математического описания необходимо включить уравнение теплового баланса, которое может быть записано для любого сечения колонны.

Модель идеального вытеснения. В предположении, что движение потоков пара и жидкости описывается гидродинамическими моделями идеального вытеснения, описание колонны включает следующие дифференциальные уравнения, характеризующие распределение концентраций в потоках по высоте насадки:

$$V \frac{dy_j}{dz} = g_j, \quad (6.190)$$

$$L \frac{dx_j}{dz} = g_j \quad (6.191)$$

или в векторной форме

$$V \frac{d\vec{y}}{dz} = S_k [K_{oy} a] (\vec{y}_p - \vec{y}), \quad (6.192)$$

$$L \frac{d\vec{x}}{dz} = S_k [K_{oy} a] (\vec{y}_p - \vec{y}). \quad (6.193)$$

Любое из уравнений (6.192), (6.193) может быть заменено дифференциальным уравнением покомпонентного баланса

$$V \frac{d\vec{y}}{dz} = L \frac{d\vec{x}}{dz} \quad (6.194)$$

и, таким образом, система уравнений математического описания насадочной колонны может быть представлена любым из уравнений (6.192), (6.193) и уравнением (6.194).

Дифференциальные уравнения, описывающие распределение концентраций компонентов по высоте насадки, должны удовлетворять граничным условиям

$$\vec{x}(0) = \vec{x}^{(0)}; \quad \vec{y}(0) = \vec{y}^{(0)}, \quad (6.195)$$

с использованием которых дифференциальное уравнение (6.194) может быть проинтегрировано и представлено в виде

$$L\vec{x} - V\vec{y} = L\vec{x}^{(0)} - V\vec{y}^{(0)}, \quad (6.196)$$

Диффузионная модель. В предположении, что в потоках пара и жидкости существует продольное перемешивание, система уравнений, описывающих распределение концентраций компонентов в потоках по высоте насадки, имеет вид

$$\frac{d_n}{Pe_V} \frac{d^2 y_j}{dz^2} - \frac{dy_j}{dz} + \frac{1}{V} g_j = 0 \quad (j = \overline{1, M}), \quad (6.197)$$

$$\frac{d_n}{Pe_L} \frac{d^2 x_j}{dz^2} + \frac{dx_j}{dz} - \frac{1}{L} g_j = 0 \quad (j = \overline{1, M}) \quad (6.198)$$

или в векторной форме

$$\frac{d_n}{Pe_V} \frac{d^2 \vec{y}}{dz^2} - \frac{d\vec{y}}{dz} + \frac{S_k}{V} [K_{0y} a] (\vec{y}_p - \vec{y}) = 0, \quad (6.199)$$

$$\frac{d_n}{Pe_L} \frac{d^2 \vec{x}}{dz^2} + \frac{d\vec{x}}{dz} - \frac{S_k}{L} [K_{0y} a] (\vec{y}_p - \vec{y}) = 0, \quad (6.200)$$

где использовано следующее выражение для числа Пекле:

$$Pe = \frac{Wd}{D_l}, \quad (6.201)$$

Система уравнений (6.199), (6.200) должна удовлетворять граничным условиям, заданным для верхнего и нижнего сечений насадки в колонне и имеющим вид

$$\vec{y}(0-) = \vec{y}(0+) - \frac{d_n}{Pe_V} \frac{d\vec{y}(0_+)}{dz}, \quad (6.202)$$

$$\frac{d\vec{y}(H)}{dz} = 0, \quad (6.203)$$

$$\vec{x}(H_+) = \vec{x}(H_-) + \frac{d_H}{Pe_L} \frac{d\vec{x}(H_-)}{dz}, \quad (6.204)$$

$$\frac{d\vec{x}(0)}{dz} = 0. \quad (6.205)$$

Таким образом, для расчета распределения концентраций по высоте насадочной колонны на основе диффузионной модели необходимо проинтегрировать систему 2M уравнений (6.197), (6.198) второго порядка с двухточечными граничными условиями (6.202)–(6.205).

Оценка влияния продольного перемешивания. Поскольку вычислительные трудности существенно возрастают при использовании диффузионной модели по сравнению с моделью идеального вытеснения, целесообразно определить область возможного использования последней в задачах математического моделирования колонн ректификации.

Принципиально эта задача может решаться двумя способами. Первый из них заключается в оценке режимов разделения, моделируемых при допущении идеального вытеснения в потоках. Критерием возможного применения этой модели служит малость диффузионного переноса компонента в потоке по сравнению с переносом компонента самим потоком. Если уравнение (6.198), описывающее распределение концентраций в потоке жидкости с учетом продольного перемешивания, представить в виде

$$\frac{d}{dz} \left(\frac{d_H}{Pe_L} \frac{dx_j}{dz} - x_j \right) + \frac{g_j}{L} = 0, \quad (6.206)$$

то критерием применимости модели идеального вытеснения для описания движения потока служит выполнение следующего неравенства:

$$\frac{d_H}{Pe_L} \left| \frac{dx_j}{dz} \right| \ll x_j, \quad (6.207)$$

означающего, что перенос компонента в потоке вследствие продольного перемешивания пренебрежимо мал по сравнению с переносом компонента потоком.

При использовании модели идеального вытеснения величина производной в соотношении (6.207) определяется равенством

$$\left| \frac{dx_j}{dz} \right| = \frac{1}{L} |g_j|. \quad (6.208)$$

Поэтому неравенство (6.207) можно переписать в виде

$$\frac{d_H}{Pe_L} |g_j| \ll L x_j. \quad (6.209)$$

Отсюда следует, что если выполняется условие

$$L > \frac{d_H |g_j|}{Pe_L x_j}, \quad (6.210)$$

то при моделировании колонны можно пренебречь продольным перемешиванием, т.е. расчет, для которого выполняется условие (6.210), может проводиться на основе модели идеального вытеснения.

Для практического использования полученного условия его можно представить в виде

$$\left| \frac{d_n |g_j|}{Pe_L L x_j} - 1 \right| = \epsilon_j. \quad (6.211)$$

Тогда величина ϵ_j может служить количественной оценкой возможности применения модели идеального вытеснения. Если, например, допустимая погрешность задания величин потоков превосходит значение ϵ_j , то применение модели идеального вытеснения вполне допустимо.

В условии (6.210) скорость массопередачи j -го компонента может быть представлена в виде

$$g_j = S_k K_{ox}^* a_j (x_j - x_{pj}), \quad (6.212)$$

где $K_{ox}^* a_j$ определяется как приведенный коэффициент массопередачи j -го компонента, который находится делением скорости массопередачи j -го компонента, определяемой уравнением (6.189), на движущую силу массопередачи этого компонента, выраженную в терминах жидкой фазы. Очевидно, что величина этого приведенного коэффициента массопередачи в общем случае зависит от движущих сил всех компонентов и изменяется по высоте насадки.

С учетом выражения (6.212) условие (6.210) может быть представлено в виде

$$\frac{Pe_L}{d_n} > \frac{S_k K_{ox}^* a_j}{L} \frac{|x_j - x_{pj}|}{x_j} \quad (6.213)$$

или с учетом обозначения

$$N_{oxj}^* = \frac{S_k K_{ox}^* a_j}{L} \quad (6.214)$$

следующим образом:

$$\frac{Pe_L}{d_n} > N_{oxj}^* \left| 1 - \frac{x_{pj}}{x_j} \right|. \quad (6.215)$$

Величина N_{oxj}^* , определенная соотношением (6.214), представляет собой число единиц переноса для j -го компонента, соответствующее единице высоты насадки. Абсолютная величина выражения, стоящего под знаком модуля в неравенстве (6.215), обычно не превышает единицы, поэтому условие применимости модели идеального вытеснения может быть также записано в виде

$$\frac{Pe_L}{d_n} > N_{oxj}^*. \quad (6.216)$$

При использовании полученных выше неравенств для оценки возможности применения модели идеального вытеснения они, вообще говоря, должны проверяться по профилям концентраций для всех компонентов и по всей высоте колонны.

Следует подчеркнуть, что, несмотря на то, что рассмотренный способ оценки основывается на анализе профилей концентраций, рассчитанных с помощью модели идеального вытеснения, полученные оценки являются в достаточной мере надежными, поскольку наличие продольного перемешивания приводит к сглаживанию профилей концентраций, т.е. к уменьшению по абсолютной величине значения производной dx/dz , в силу чего найденные оценки всегда обладают определенным запасом.

Другой способ проверки возможности использования модели, основанной на допущении идеального вытеснения в потоках пара и жидкости, заключается в сравнении результатов расчета по этой модели, а также по модели, учитывающей продольное перемешивание.

Для получения аналитических оценок рассмотрим гипотетический случай разделения бинарной смеси, когда поток жидкости, в котором изменение концентрации компонента описывается уравнением типа (6.198), контактирует с неограниченным объемом пара, в котором этот компонент отсутствует. Для этого случая изменение концентрации компонента по длине зоны контакта может быть представлено уравнением

$$\frac{d_n}{Pe_L} \frac{d^2 x}{dz^2} + \frac{dx}{dz} - \frac{S_k K_{ox}^a}{L} x = 0 \quad (6.217)$$

с граничными условиями

$$x^{(0)} = x(H) + \frac{d_n}{Pe_L} \frac{dx(H)}{dz}, \quad (6.218)$$

$$\frac{dx(0)}{dz} = 0. \quad (6.219)$$

Обозначим

$$z = H - h, \quad \frac{Pe_L}{d_n} = \gamma, \quad \frac{S_k K_{ox}^a}{L} = N_{ox} = N \quad (6.220)$$

и запишем уравнение (6.217) и граничное условие (6.218) в виде

$$\frac{d^2 x}{dh^2} - \gamma \frac{dx}{dh} - \gamma N x = 0. \quad (6.221)$$

$$x^{(0)} = x(0) - \frac{1}{\gamma} \frac{dx(0)}{dh}. \quad (6.222)$$

Решение уравнения (6.221) имеет вид

$$x(h) = C_1 \exp(\lambda_1 h) + C_2 \exp(\lambda_2 h). \quad (6.223)$$

где C_1 и C_2 — постоянные интегрирования, определяемые из граничных условий; λ_1 и λ_2 — корни характеристического уравнения

$$\lambda^2 - \gamma\lambda - \gamma N = 0, \quad (6.224)$$

которые определяются равенствами

$$\lambda_1 = \frac{\gamma}{2} (1 + \sqrt{\Delta}), \quad (6.225)$$

$$\lambda_2 = -\frac{\gamma}{2} (\sqrt{\Delta} - 1), \quad (6.226)$$

где

$$\Delta = 1 + 4 \frac{N}{\gamma}. \quad (6.227)$$

В результате определения постоянных интегрирования можно получить следующее выражение для концентрации компонента в конце зоны контакта:

$$x(H) = \frac{4x^{(0)} \sqrt{\Delta} \exp \left[\frac{\gamma}{2} (1 - \sqrt{\Delta}) H \right]}{(\sqrt{\Delta} + 1)^2 - (\sqrt{\Delta} - 1)^2 \exp [-\gamma \sqrt{\Delta} H]}. \quad (6.228)$$

Для модели идеального вытеснения соответственно можно получить

$$x_{\text{ид}}(H) = x^{(0)} \exp(-N_{\text{ид}} H). \quad (6.229)$$

Задачу сравнения моделей теперь можно сформулировать в двух вариантах:

1. Концентрации $x(H)$ и $x_{\text{ид}}(H)$ полагают равными и определяют различие в величинах N и $N_{\text{ид}}$, которое обеспечивает это равенство.
2. Числа единиц переноса N и $N_{\text{ид}}$ полагают равными и определяют различие в рассчитываемых значениях $x(H)$ и $x_{\text{ид}}(H)$.

Первый вариант соответствует задаче определения параметров массообмена с использованием модели идеального вытеснения, в которой представляет интерес оценка погрешности, вносимой неучетом продольного перемешивания.

Второй вариант соответствует задаче моделирования, в которой важна оценка погрешности, вносимой неучетом продольного перемешивания в расчетные значения концентраций компонентов.

Для получения аналитических оценок предположим, что

$$\frac{N}{\gamma} \ll 1, \quad (6.230)$$

т.е. что выполняется условие (6.216).

Тогда выражение (6.228) можно существенно упростить благодаря использованию в нем вместо функциональных зависимостей их разложений в ряды по степеням отношения N/γ ; в результате элементарных преобразований из него можно получить, что

$$x(H) = x^{(0)} \exp \left\{ -NH \left[1 - \frac{N}{\gamma} + 2 \left(\frac{N}{\gamma} \right)^2 \right] \right\}. \quad (6.231)$$

Формула (6.231) справедлива с точностью до членов второго порядка малости относительно N/γ .

Сравнивая выражения (6.231) и (6.229), получим соотношение

$$N_{\text{ид}} = N \left[1 - \frac{N}{\gamma} + 2 \left(\frac{N}{\gamma} \right)^2 \right], \quad (6.232)$$

дающее значения чисел единиц переноса, определяемые с применением модели идеального вытеснения, и модели, учитывающей продольное перемешивание. Из него следует, что величина $N_{\text{ид}}$, найденная с использованием модели идеального вытеснения, всегда оказывается заниженной по сравнению с аналогичной величиной N , определяемой с учетом продольного перемешивания.

При этом ошибка определения во втором приближении составляет

$$\epsilon_N^{(2)} = \frac{N_{\text{ид}} - N}{N} = \frac{N}{\gamma} - 2 \left(\frac{N}{\gamma} \right)^2, \quad (6.233)$$

с точностью до членов первого порядка имеем

$$\epsilon_N^{(1)} = \frac{N}{\gamma}. \quad (6.234)$$

Из последних формул при оценке ошибок следует отдавать предпочтение формуле (6.234), поскольку она дает несколько завышенное значение по сравнению с формулой (6.233) и, следовательно, позволяет более надежно оценить возможность использования модели идеального вытеснения.

Для второго варианта задачи сравнения моделей по рассчитанным значениям концентраций $x(H)$ и $x_{\text{ид}}(H)$ при равных величинах N и $N_{\text{ид}}$ справедливо соотношение

$$\frac{x(H) - x_{\text{ид}}(H)}{x(H)} = 1 - \exp \left\{ -NH \left[\frac{N}{\gamma} - 2 \left(\frac{N}{\gamma} \right)^2 \right] \right\}, \quad (6.235)$$

в результате разложения которого в ряд по степеням отношения N/γ получим формулу оценки ошибки при расчете концентраций с точностью до членов второго порядка малости по N/γ :

$$\epsilon_x^{(2)} = NH \left[\frac{N}{\gamma} - (4 + NH) \left(\frac{N}{\gamma} \right)^2 \right] \quad (6.236)$$

с точностью до членов первого порядка малости

$$\epsilon_x^{(1)} = NH \frac{N}{\gamma}. \quad (6.237)$$

Из последних соотношений следует, что величина ошибки в расчете концентраций определяется не только величиной отношения N/γ , но также величиной произведения NH , которое представляет собой не что иное, как общее число единиц переноса.

Приведенные выше формулы оценок выведены с помощью гипотетической модели, для которой имеют место наибольшие градиенты концентраций, поскольку рассматривается массообмен под действием односторонней движущей силы. В реальных условиях ректификации, когда движущие силы массообмена, как правило, значительно меньше и соответственно меньше градиенты концентраций, погрешности от использования модели идеального вытеснения также будут меньше, чем предсказываемые формулами (6.234) и (6.237), что дает возможность уверенного использования найденных оценок для определения применимости модели идеального вытеснения при моделировании реальных насадочных колонн многокомпонентной ректификации.

Проектный расчет насадочной ректификационной колонны на основе модели идеального вытеснения фаз. Задача проектного расчета ректификационной насадочной колонны для разделения многокомпонентной смеси состоит в том, чтобы для заданного количества смеси F и известного состава $\vec{X}_F$ определить высоту, диаметр колонны, диаметр насадки, флегмовое число, гидродинамический режим, при которых будет достигнута заданная степень разделения по целевому компоненту при минимуме выбранного критерия оптимизации. В качестве критерия оптимизации часто используется экономический критерий — приведенные затраты, представляющие собой сумму эксплуатационных ЭЗ и капитальных КЗ затрат:

$$\text{Пр.З} = \text{ЭЗ} + E_n \text{КЗ}, \quad (6.238)$$

где E_n — нормативный коэффициент.

Согласно модели идеального вытеснения математическое описание укрепляющей (индекс "1") и исчерпывающей (индекс "2") секций колонны имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} V_{1(2)} \frac{d\vec{Y}}{dl} &= S [K_{0y} a] (\vec{Y}_p - \vec{Y}) = \vec{N}_{1(2)} V, \\ L_{1(2)} \frac{d\vec{X}}{dl} &= S [K_{0x} a] (\vec{X} - \vec{X}_p) = \vec{N}_{1(2)} L, \end{aligned} \quad (6.239)$$

где V — поток паровой фазы по колонне; L — поток жидкой фазы по колонне; S — площадь поперечного сечения колонны;

$$\begin{aligned} \vec{Y} &= \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{M-1} \end{pmatrix}; & \vec{X} &= \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{M-1} \end{pmatrix}; \\ [K_{0y(0x)} a] &= \begin{pmatrix} k_{1,1} & k_{1,2} & \dots & k_{1,M-1} \\ k_{2,1} & k_{2,2} & \dots & k_{2,M-1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ k_{M-1,1} & k_{M-1,2} & \dots & k_{M-1,M-1} \end{pmatrix}; \end{aligned}$$

M — число компонентов.

Уравнения рабочей линии для укрепляющей секции имеют вид

$$L_1 \vec{X} = V_1 \vec{Y} - P \vec{X}_p, \quad (6.241)$$

для исчерпывающей секции — вид

$$L_2 \vec{X} = V_2 \vec{Y} + W \vec{X}_w. \quad (6.242)$$

В уравнениях (6.241), (6.242) P — количество дистиллята; W — количество кубового остатка; $\vec{X}_p$ — вектор состава дистиллята; $\vec{X}_w$ — вектор состава кубового продукта.

Для эквимолярного массообмена потоки массы из одной фазы в другую равны $\vec{N}^V = \vec{N}^L$. Учитывая также, что $L_1 = PR$ (R — флегмовое число) и $V_1 = P(R + 1)$, а $L_2 = PR + F$ и $V_2 = P(R + 1)$, получаем системы уравнений для укрепляющей части колонны:

$$\frac{d\vec{Y}}{dl} = \frac{\pi D^2}{4P(R+1)} [K_{0y} a] (\vec{Y}_p - \vec{Y}), \quad (6.243)$$

$$\vec{X} = \frac{R+1}{R} \vec{Y} - \frac{1}{R} \vec{X}_p$$

и исчерпывающей части:

$$\frac{d\vec{Y}}{dl} = \frac{\pi D^2}{4P(R+1)} [K_{0y} a] (\vec{Y}_p - \vec{Y}), \quad (6.244)$$

$$\vec{X} = \frac{P(R+1)}{F+PR} \vec{Y} + \frac{F-P}{F+PR} \vec{X}_w.$$

В уравнениях (6.243), (6.244) D — диаметр колонны; $\vec{Y}_p$ — вектор равновесных составов пара.

Интегрирование систем уравнений (6.243), (6.244) позволяет получить высоты укрепляющей H_1 и исчерпывающей частей H_2 колонны.

Равновесный состав пара y_{ip} в предположении об идеальности паровой фазы находится по формуле

$$y_{ip} = \frac{\gamma_i P_i^{(0)}(T)}{P} x_i \quad (i = 1, 2, \dots, M-1), \quad (6.245)$$

где P — общее давление; $P_i^{(0)}(T)$ — давление паров чистого i -го компонента, определяемое выражением

$$P_i^{(0)}(T) = \exp(C_{i1} + C_{i2}/T + C_{i3}T + C_{i4} \ln T), \quad (6.246)$$

C_{ij} — эмпирические коэффициенты.

Неидеальность жидкой фазы, определяемая коэффициентом активности γ_i , может выражаться как функция состава фазы и температуры с помощью одного из известных полуэмпирических выражений (например, модели Вильсона, НРТЛ, ЮНИКВАК, ЮНИФАК и т.д.).

Простым и эффективным методом оценки матрицы коэффициентов массопередачи $[K_{0y}a]$ является метод, в котором искомая матрица $[K_{0y}a]$ определяется через коэффициенты массопередачи K_{ij} в бинарных смесях, образованных всеми компонентами, входящими в многокомпонентную смесь:

$$[K_{0y}] = [A]^{-1}, \quad (6.247)$$

где

$$A_{ii} = \frac{y_i}{K_{iM}(y_i)} + \sum_{k \neq i} \frac{y_k}{K_{ik}(y_i)}, \quad (6.248)$$

$$A_{ij} = -y_i \left[\frac{1}{K_{ij}(y_i)} - \frac{1}{K_{iM}(y_i)} \right], i, j = 1, \dots, M-1. \quad (6.249)$$

Бинарные коэффициенты являются функцией концентрации $K_{ij} = K_{ij}(y_i)$, причем y_i равно концентрации компонента i в многокомпонентной смеси.

Общий проектный расчет насадочной колонны целесообразно разбить на ряд взаимосвязанных подзадач. Охарактеризуем их.

Подзадача расчета равновесия в системе жидкость — пар. Ее решение позволяет найти вектор равновесных концентраций $\bar{Y}_p$ и температуру кипения T по известному составу жидкости и общему давлению P (уравнения (6.245), (6.250):

$$\sum_{i=1}^M \frac{\gamma_i P_i^{(0)}(T)}{P} x_i - 1 = 0. \quad (6.250)$$

Подзадача расчета матрицы наклона равновесных линий. Эта матрица имеет вид

$$[M] = \begin{bmatrix} \frac{\partial y_{1p}}{\partial x_1} & \frac{\partial y_{1p}}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial y_{1p}}{\partial x_{M-1}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial y_{M-1,p}}{\partial x_1} & \frac{\partial y_{M-1,p}}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial y_{M-1,p}}{\partial x_{M-1}} \end{bmatrix}. \quad (6.251)$$

Элементы матрицы $[M]$ определяются по формулам

$$m_{ij} = \frac{y_{jp}}{x_j} (\delta_{ij} - y_{ip}) + y_{ip} \frac{y_{Mp}}{x_M}, \quad (6.252)$$

где

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{если } i = j; \\ 0, & \text{если } i \neq j. \end{cases} \quad (6.253)$$

Подзадача расчета матрицы коэффициентов массопередачи. Для ее решения следует использовать уравнения (6.247) — (6.249). В случае трех-

компонентной смеси элементы матрицы $[K_{0y}a]$ выражаются следующим образом:

$$k_{11} = K_{13}(y_1 K_{23} + (1 - y_1) K_{12})/S, \quad (6.254)$$

$$k_{12} = y_1 K_{23}(K_{13} - K_{12})/S, \quad (6.255)$$

$$k_{21} = y_2 K_{13}(K_{23} - K_{12})/S, \quad (6.256)$$

$$k_{22} = K_{23}(y_2 K_{13} + (1 - y_2) K_{12})/S, \quad (6.257)$$

$$S = y_1 K_{23} + y_2 K_{13} + y_3 K_{12}. \quad (6.258)$$

Подзадача интегрирования системы дифференциальных уравнений (6.243), (6.244). Решение данной подзадачи может проводиться одним из методов численного интегрирования (например, методом Эйлера, методом Рунге-Кутты). Это решение позволяет определить необходимую высоту колонны, обеспечивающую требуемую степень выделения целевого компонента.

Подзадача расчета физико-химических свойств компонентов и их смесей: вязкости пара и жидкости (μ_y и μ_x), плотности пара и жидкости (γ_y , γ_x).

Диаметр насадочной колонны D определяется по формуле

$$D = \sqrt{\frac{V}{0,785 w_y}} \quad (6.259)$$

где V — объемный расход пара; w_y — скорость пара, отнесенная к полному сечению колонны.

Рабочая скорость пара в колонне w_y обычно принимается несколько меньшей скорости пара в точке инверсии фаз $w_{\text{инв}}$ и равна $w_y = (0,80 \div 0,85) w_{\text{инв}}$. Скорость, при которой наступает инверсия фаз в насадочных колоннах, можно определить по уравнению

$$\lg \left[\frac{w_{\text{инв}}^2 \sigma}{\varepsilon V_c^3} \frac{\gamma_y}{\gamma_x} \left(\frac{\mu_x^{1/8}}{\mu} \right)^{1/9} \right] = A - 1,75 \left(\frac{L}{V} \right)^{1/4} \left(\frac{\gamma_y}{\gamma_x} \right)^{0,16} \quad (6.260)$$

где σ — удельная поверхность насадки; V_c — свободный объем насадки; A — коэффициент (для ректификации 0,125; для абсорбции 0,022); L/V — отношение массовых расходов жидкости и пара.

В случае ректификационных колонн для укрепляющей части справедлива формула

$$\frac{L}{V} = \frac{B}{R + 1}, \quad (6.261)$$

для исчерпывающей части — формула

$$\frac{L}{V} = \frac{R + (F/P)}{R + 1}. \quad (6.262)$$

На рис. 6.11 приведена блок-схема алгоритма расчета скорости пара в точке инверсии $w_{\text{инв}}$, скорости потоков пара и жидкости w_y , w_x по ко-

лонне, диаметра колонны D , высоты секций, а также критерия оптимизации.

Исходной информацией для расчета являются количество питания F , его состав $\vec{X}_F$ и содержание целевого компонента в одном из продуктов x_{w1} (x_{p1}). Далее задают начальное приближение содержания второго компонента в одном из продуктов: x'_{w2} (для исчерпывающей части) или x'_{p2} (для укрепляющей части). При этом содержание третьего компонента (x'_{w3} или x_{p3}) определяют из уравнений баланса. На следующем шаге вычисляют вязкость и плотность исходной смеси и кубового остатка (или дистиллята). Затем определяют скорость пара в точке инверсии фаз, реальные скорости пара и жидкости w_y, w_x , диаметр колонны D . На следующих этапах последовательно рассчитывают матрицу тангенсов углов наклона равновесных зависимостей $[M0]$, матрицу объемных коэффициентов массопередачи $[K_{0y}, q]$ и вектор равновесного состава пара

$$\vec{Y}_p(\vec{X}) = \vec{Y}_p(\vec{XN}) + [M_0(\vec{XN})] (\vec{X} - \vec{XN}). \quad (6.263)$$

Начальными условиями системы дифференциальных уравнений служат значения составов $\vec{XN} = \vec{X}_F$. Вводятся три величины: ϵ_x — интервал проверки постоянства значений коэффициентов матрицы тангенсов углов наклона равновесной зависимости $[M0]$; ϵ_c — точность вычисления концентрации по интегрируемому компоненту. Величине x_{cp} присваивают значение XN_1 . До тех пор, пока x_1 не достигнет заданной величины x_{w1} (или x_{p1}), проверяют выполнение условия $|x_{cp} - x_1| \leq \epsilon_x$. Если оно выполняется, то интегрирование продолжают дальше; если нет, то вычисляют новую матрицу $[M1]$ и для всех i и j проверяют выполнение условия

$$\Delta = \left| \frac{m_{1j} \dot{y} - m_{0j} \dot{y}}{m_{0j} \dot{y}} \right| > \epsilon_m \quad (6.264)$$

Если $\Delta > \epsilon_m$, то $\vec{XN}$ присваивают текущее значение $\vec{X}$ и интегрирование ведут при новом значении матрицы $[M1]$. Если же $\Delta \leq \epsilon_m$, то выбирают новый участок по x_1 , т.е. $x_{cp} = x_{тек}$, и интегрирование продолжают. В момент достижения заданной концентрации по целевому компоненту x_{w1} (или x_{p1}) фиксируют полученную высоту исчерпывающей (или укрепляющей) части колонны и проверяют условие

$$\left| \frac{x_{w2} - x_{w2}^1}{x_{w2}^1} \right| \leq \epsilon_c \quad \text{или} \quad \left| \frac{x_{p2} - x_{p2}^1}{x_{p2}^1} \right| \leq \epsilon_c. \quad (6.265)$$

В случае выполнения последнего условия расчет считают законченным и выводят полученные значения конструктивных и режимных параметров (H, D, w_y, w_x и др.) для данных значений $R, d_{нас}, w_y/w_{унив}$.

В противном случае задается новое приближение x_{w2}^1 (или x_{p2}^1) и расчет повторяют до выполнения условия (6.261).

В целом последовательность проектного расчета насадочной ректификационной колонны такова. Для исходных значений параметров $R, d_{нас}$

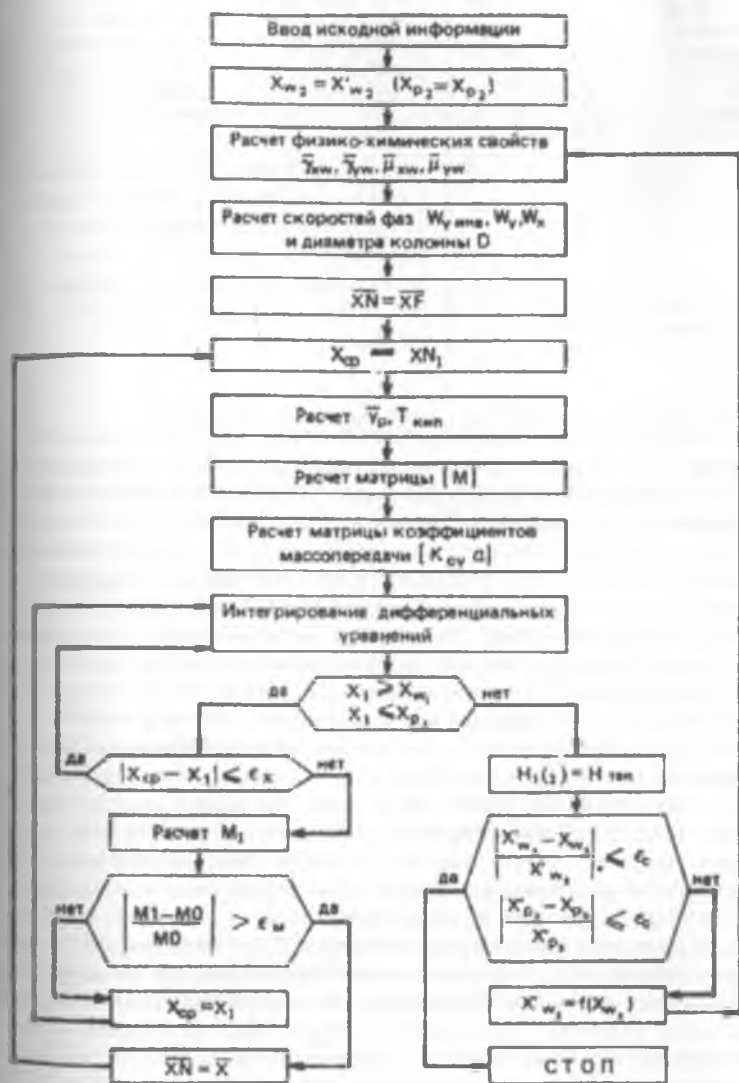


Рис. 6.11. Блок-схема расчета гидродинамических и конструктивных параметров насадочной колонны



Рис. 6.12. Блок-схема алгоритма общего расчета насадочной колонны

$w_y/w_{y\max}$ производят расчет колонны по ранее изложенному алгоритму, вычисляют критерий Пр.3, значение которого минимизируется одним из методов поиска экстремума. Схема алгоритма общего расчета колонны представлена на рис. 6.12.

§ 6.6. Модели и алгоритмы расчета процесса абсорбции

Абсорбцией называется процесс поглощения газа жидкостью, в которой газ в той или иной степени растворим. Обратный процесс — выделение растворенного газа из раствора — называется *десорбцией*.

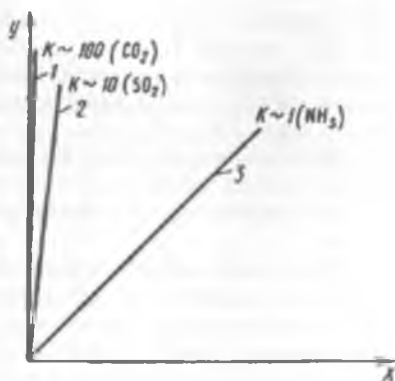
В абсорбционных процессах участвуют две фазы — жидкая и газовая, между которыми происходит перенос вещества из газовой фазы в жидкую (в случае абсорбции) и из жидкой фазы в газовую (десорбция).

На практике абсорбции подвергают большей частью не отдельные газы, а газовые смеси, составные части которых могут поглощаться жидкостью (абсорбентом). Эти составные части называют *абсорбируемыми компонентами*, а непоглощаемые составные части — *инертным газом*.

Абсорбционные процессы находят широкое применение в химической промышленности. Это получение готовых продуктов путем поглощения газа жидкостью (абсорбция SO_2 в производстве серной кислоты, абсорбция HCl с получением соляной кислоты и т.д.), разделение газовых смесей для выделения одного или нескольких ценных компонентов смеси, очистка газов от вредных примесей, улавливание ценных компонентов из газовой смеси для предотвращения их потерь.

По физико-химической сущности абсорбция является типичным массообменным процессом, в котором массообмен происходит на поверхности соприкосновения жидкой и газовой фаз. Поэтому абсорбционные аппараты должны иметь развитую поверхность контакта фаз. Исходя из этого абсорбционные аппараты (абсорберы) можно подразделить на следующие группы: а) поверхностные абсорберы, в которых поверхностью контакта фаз является зеркало жидкости или поверхность текущей пленки жидкости (пленочные абсорберы); б) барботажные абсорберы, в которых поверхность контакта фаз развивается потоками газа, распределяющегося в жидкости в виде пузырьков и струек; в) распыливающие абсорберы, в которых поверхность контакта образуется путем распыления жидкости в массе газа на мелкие капли. Конструктивно наибольшее распространение имеют насадочные и тарельчатые абсорберы колонного типа.

рис. 6.13. Зависимость равновесной концентрации в газе y от концентрации в жидкости x : 1 — труднорастворимые газы; 2 — газы со средней растворимостью; 3 — легко растворимые газы



Исходя из блочного принципа составления математических моделей описание процесса абсорбции должно включать: описание фазового равновесия в системе жидкость — газ, кинетику протекания процесса, описание структуры потоков фаз в аппарате. Остановимся далее на каждом из указанных блоков.

Равновесие в системе газ — жидкость. Как отмечалось ранее (см. § 6.2), в области малых концентраций в жидкости (плохо растворимый газ) равновесие может быть с достаточной точностью описано с помощью закона Генри, справедливого для идеальных растворов:

$$y = Kx, \quad (6.266)$$

где K — константа Генри.

В общем случае по растворимости в жидкости газы разделяются на: а) труднорастворимые; б) легко растворимые; в) со средней растворимостью. На рис. 6.13 приведены равновесные концентрации в газе y и в жидкости x для указанных случаев.

Для газов со сравнительно высокой растворимостью закон Генри справедлив лишь при низких концентрациях, так как любой раствор при сильном разбавлении приближается к идеальному. При более высоких концентрациях растворимость обычно ниже, чем это следует из закона Генри. В таких случаях константа Генри K зависит от состава и равновесная зависимость нелинейна.

В реальных растворах силы взаимодействия между молекулами растворенного газа не равны силам взаимодействия между молекулами растворенного газа и растворителя. Для таких растворов закон Генри в форме уравнения (6.266) неприменим. В этом случае имеем

$$f = \gamma P_K^0 x, \quad (6.267)$$

где f — фугитивность газа; γ — коэффициент активности; P_K^0 — давление пара чистого вещества.

Кинетика процесса абсорбции. При отсутствии равновесия между газовой и жидкой фазами происходит перенос вещества из одной фазы в другую. Процесс массопередачи состоит из переноса вещества в пределах каждой из фаз (массоотдача) и переноса вещества через границу раздела фаз.

Обычно считают, что сопротивление переходу вещества на границе фаз отсутствует. Такое предположение равносильно допущению о существовании в каждый момент времени равновесия у поверхности соприкосновения фаз.

Движущей силой процесса переноса вещества является отклонение системы от равновесия, т.е. разность химических потенциалов в фазах. Если температуры фаз одинаковы, то в качестве движущей силы можно взять разность концентраций. В первом приближении количество передаваемого вещества пропорционально поверхности раздела фаз и движущей силе. В процессе массоотдачи движущей силой является разность между концентрацией передаваемого вещества в ядре фазы и его концентрацией у границы раздела фаз. Если эта разность положительна, то вещество передается из фазы к границе раздела фаз, а если она отрицательна – в противоположном направлении.

При рассмотрении процесса массопередачи за движущую силу принимают разность между фактической концентрацией компонента в одной из фаз и равновесной концентрацией в ней данного компонента. Такие представления о процессах массоотдачи и массопередачи равносильны предположению о существовании в каждой из фаз некоторого сопротивления переносу вещества. В отсутствие сопротивления у поверхности раздела общее сопротивление процессу переноса складывается из сопротивлений в каждой из фаз, т.е. справедливо предположение об аддитивности фазовых сопротивлений.

Рассмотрим вопросы кинетики абсорбции применительно к физической абсорбции и хемосорбции.

Физическая абсорбция. Скорость переноса вещества из ядра потока к границе раздела фаз (массоотдача) при физической абсорбции определяется как

$$J = \beta F \Delta C, \quad (6.268)$$

где J – поток вещества в единицу времени; F – поверхность контакта фаз; ΔC – разность концентраций.

Уравнение (6.268) не вскрывает сложный механизм переноса вещества, а лишь отражает соотношение между потоком вещества, поверхностью контакта фаз F и движущей силой процесса ΔC . В данном случае механизм переноса заложен в величине β , называемой коэффициентом массоотдачи. Исходя из различных моделей массопередачи (плёночной, проницания, обновления поверхности) получены выражения для коэффициента массоотдачи β , как функции гидродинамической обстановки и свойств фаз. Следовательно, скорость физической абсорбции зависит не только от

свойств фаз, но и в значительной мере от структуры потоков в аппарате.

Уравнения массопередачи по форме аналогичны уравнениям массоотдачи. Однако между ними имеется и важное различие. В уравнении массоотдачи движущая сила является разностью концентраций в фазе и у границы фаз, причем последняя концентрация реально существует. В уравнении массопередачи

$$J = K_y F(y - y^*) = \frac{F(y - y^*)}{\frac{1}{\beta_y} + \frac{m}{\beta_x}} \quad (6.269)$$

движущей силой является разность между реальной концентрацией одной из фаз (y) и некоторой предельной концентрацией y^* , не существующей в неравновесном процессе.

В уравнении (6.269) член $1/\beta_y$ представляет собой сопротивление массопередаче, оказываемое газовой фазой, а член m/β_x — сопротивление жидкой фазы (m — тангенс угла наклона равновесной зависимости). Сумма этих величин $1/K_y$ есть общее сопротивление массопередаче. Доля каждого из фазовых сопротивлений в общем сопротивлении определяется не только значениями β_y и β_x , а главным образом величиной m . При малых m (хорошо растворимые газы) член m/β_x в уравнении (6.269) мал по сравнению с $1/\beta_y$ и сопротивлением жидкой фазы можно пренебречь. Тогда $K_y \approx \beta_y$.

Наоборот, при больших m (плохо растворимые газы) член m/β_x становится большим по сравнению с $1/\beta_y$. В этом случае основное сопротивление сосредоточено в жидкой фазе и сопротивлением газовой фазы можно пренебречь. Тогда $K_y \approx \beta_x/m$.

При средних значениях m (умеренно растворимые газы) сопротивления каждой из фаз выражаются величинами одного порядка и пренебрегать одним из них нельзя.

Отметим, что истинная поверхность контакта фаз бывает известна довольно редко, так как она зависит от режима движения фаз. Даже в аппаратах с фиксированной поверхностью контакта (например, насадочных абсорберах) действительная поверхность контакта, активная с точки зрения массопередачи, не совпадает с геометрической поверхностью насадки. Поэтому на практике часто пользуются коэффициентами массопередачи, отнесенными к единице рабочего объема аппарата (объемный коэффициент массопередачи). Связь между объемным (K_V) и поверхностным (K) коэффициентами массопередачи выражается уравнением

$$K_V = Ka, \quad (6.270)$$

где a — удельная поверхность контакта фаз, т.е. поверхность, приходящаяся на единицу рабочего объема аппарата.

Аналогично можно найти объемные коэффициенты массоотдачи β_{yu} и β_{xu} , для чего следует умножить на a соответствующие поверхностные коэффициенты.

Хе м о с о р б ц и я. Протекание химической реакции в процессе абсорбции оказывает влияние как на равновесие между фазами, так и на кинетику абсорбции, причем кинетика процесса в этом случае определяется не только скоростью массообмена, но и скоростью реакции.

Рассмотрим случай, когда реакция между растворенным газообразным компонентом и абсорбентом протекает в жидкой фазе. При этом часть компонента переходит в связанное состояние и концентрация свободного компонента в жидкости понижается. Такое понижение приводит к увеличению концентрационного градиента и ускорению абсорбции в жидкой фазе по сравнению с физической абсорбцией. Это ускорение тем больше, чем выше скорость химической реакции.

При значительных скоростях реакции ускорение абсорбции может быть настолько большим, что сопротивление жидкой фазы становится пренебрежимо малым. Наоборот, при очень медленных реакциях ускорение мало и им можно пренебречь, рассматривая процесс как физическую абсорбцию.

Ускорение абсорбции при протекании химической реакции в жидкой фазе может быть учтено двумя способами: увеличением коэффициента массоотдачи в жидкой фазе, если считать движущую силу такой же, как при физической абсорбции; увеличением движущей силы, если считать коэффициент массоотдачи таким же, как при физической абсорбции.

Между обоими способами существует зависимость

$$J = \beta'_ж F \Delta C_ж = \beta_ж F (\Delta C_ж + \delta C). \quad (6.271)$$

Отсюда находим коэффициент ускорения абсорбции в жидкости:

$$\kappa = \frac{\beta'_ж}{\beta_ж} = 1 + \frac{\delta C}{\Delta C_ж}. \quad (6.272)$$

В уравнениях (6.271), (6.272) $\beta_ж$ — коэффициент массоотдачи в жидкой фазе при физической абсорбции; $\beta'_ж$ — коэффициент массоотдачи в жидкой фазе при протекании в ней реакции, отнесенный к движущей силе при физической абсорбции ($\Delta C_ж = C_p - C$).

Величина δC показывает увеличение движущей силы в жидкой фазе при протекании в ней реакции.

В соответствии с двумя способами анализа абсорбции, сопровождаемой химической реакцией в жидкой фазе, можно пользоваться коэффициентом массопередачи K_y , определяемым с помощью уравнения (6.82) по величине $\beta_ж$ (в этом случае движущая сила в жидкой фазе равна $\Delta C_ж + \delta C$), или же коэффициентом массопередачи K' , определяемым по величине $\beta'_ж$ из аналогичного уравнения

$$\frac{1}{K'} = \frac{1}{\beta_r} + \frac{m}{\beta'_j} \quad (6.273)$$

Таким образом, уравнение массопередачи можно записать в виде

$$J = K'F(P - P^*) = K'F(P - mC) \quad (6.274)$$

или в виде

$$J = KF[P - m(C - \delta C)] \quad (6.275)$$

Для анализа хемосорбции рассматривают уравнения диффузии передаваемого компонента A и активной части абсорбента B совместно с кинетическим уравнением реакции. Уравнения диффузии при протекании химической реакции имеют вид

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = D_A \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} - N \quad (6.276)$$

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} = D_B \frac{\partial^2 C_B}{\partial z^2} - nN \quad (6.277)$$

Здесь C_A , C_B — концентрации несвязанных компонентов A и B ; D_A , D_B — их коэффициенты диффузии; N — скорость расходования компонента A в единице объема на химическую реакцию; n — число киломолей B , расходующихся по реакции на 1 кмоль A . Кинетическое уравнение реакции в общем виде может быть представлено выражением

$$N = f(C_A, C_B) \quad (6.278)$$

Аналитическое решение системы уравнений (6.276)–(6.278) возможно лишь при некоторых простых формах зависимости (6.278) (линейных).

Ниже рассматриваются частные случаи решения указанной системы уравнений.

Для необратимой реакции первого порядка кинетическое уравнение имеет вид

$$N = K_1 C_A \quad (6.279)$$

где K_1 — константа скорости реакции первого порядка.

Решение системы уравнений (6.276), (6.277), (6.279) можно получить аналитически, принимая ту или иную модель переноса вещества.

В случае пленочной модели $\partial C_A / \partial t = 0$ и уравнение (6.276) примет вид

$$D \frac{d^2 C_A}{dz^2} = K_1 C_A \quad (6.280)$$

Для граничных условий

$$C_A = C_p \quad \text{при} \quad z = 0, \quad (6.281)$$

$$C_A = C_{A_j} \quad \text{при} \quad z = z_j. \quad (6.282)$$

Решение уравнения (6.280) имеет вид

$$\frac{J}{F} = \beta_{\text{ж}} \frac{a}{\tanh a} \left(C_p - \frac{C_{A_{\text{ж}}}}{\cosh a} \right), \quad (6.283)$$

где

$$a = \frac{1}{\beta_{\text{ж}}} \sqrt{DK_1}. \quad (6.284)$$

В случае модели обновления граничные условия выражаются в виде

$$C_A = C_p \quad \text{при } z = 0, \quad t > 0; \quad (6.285)$$

$$C_A = C_{A_{\text{ж}}} \quad \text{при } z = \infty, \quad t > 0; \quad (6.286)$$

$$C_A = C_{A_{\text{ж}}} \quad \text{при } z > 0, \quad t = 0. \quad (6.287)$$

Тогда решение, полученное на основе модели, есть

$$\frac{J}{F} = \beta_{\text{ж}} \sqrt{1 + a^2} \left(C_p - \frac{C_{A_{\text{ж}}}}{1 + a^2} \right). \quad (6.288)$$

При $a \rightarrow 0$ (т.е. $K_1 \rightarrow 0$) приведенные уравнения (6.283) и (6.288) переходят в обычное уравнение для физической абсорбции.

Из уравнений (6.283), (6.288) видно, что параметр a , в который входит константа скорости реакции, влияет как на коэффициент массопередачи, так и на движущую силу. При малых $C_{A_{\text{ж}}}$ влиянием a на движущую силу можно пренебречь. Тогда коэффициент ускорения абсорбции $\kappa = \beta_{\text{ж}}^* / \beta_{\text{ж}}$ будет равен:

в случае пленочной модели

$$\kappa = \frac{a}{\tanh a}, \quad (6.289)$$

в случае модели обновления

$$\kappa = \sqrt{1 + a^2}, \quad (6.290)$$

в случае модели проникания

$$\kappa = \left(a + \frac{\pi}{8a} \right) \operatorname{erf} \frac{2a}{\sqrt{\pi}} + \frac{1}{2} \exp \left(-\frac{4}{a} a^2 \right). \quad (6.291)$$

Расчет κ по формулам (6.289)–(6.291) показывает, что они дают почти совпадающие значения. Лишь при $a \approx 2$ значения κ по формуле (6.290) приблизительно на 8 % выше, чем по формуле (6.289). При меньших и больших a расхождения между формулами уменьшаются.

Отметим, что в процессах абсорбции уравнение скорости реакции обычно имеет порядок, отличный от первого. Однако при больших концентрациях активной составляющей абсорбента ($C_{B_{\text{ж}}} = \text{const}$) такое уравнение можно считать уравнением первого порядка (реакция псевдопервого порядка).

Если в жидкой фазе протекает обратимая реакция $A \xrightleftharpoons[K_2]{K_1} B$, то константа равновесия реакции K определяется выражением

$$K = \frac{K_1}{K_2} = \frac{C_B}{C_A}, \quad (6.292)$$

где K_1 и K_2 — константы скорости прямой и обратной реакций.

Решение уравнений хемосорбции для случая обратимой реакции первого порядка (6.276) — (6.278) приводит к следующим формулам для коэффициента ускорения абсорбции $\kappa_A = \beta_A / \beta_{ж}$ ($\beta_{ж}$ — коэффициент массопотдачи при физической абсорбции):

в случае пленочной модели

$$\kappa_A = \frac{1 + K}{1 + K \frac{\text{th} [a\sqrt{(1+K)/K}]}{a\sqrt{(1+K)/K}}}, \quad (6.293)$$

в случае модели обновления

$$\kappa_A = \frac{(1+K)\sqrt{1+a^2(1+K)/K}}{K + \sqrt{1+a^2(1+K)/K}}. \quad (6.294)$$

Сравнение показывает, что значения κ_A , рассчитанные на основе различных моделей, отличаются менее чем на 5%.

При $K = 0$ величина κ_A равна единице, что соответствует физической абсорбции. Случай $K \rightarrow \infty$ соответствует необратимой реакции первого порядка, рассмотренной ранее.

При протекании в жидкой фазе необратимой реакции второго порядка кинетическое уравнение имеет вид

$$N = KC_A C_B, \quad (6.295)$$

где K — константа скорости реакции второго порядка.

Так как получающаяся система уравнений (6.276), (6.277), (6.295) нелинейна, то решение ее может быть получено численно либо аналитически при некоторых допущениях, позволяющих выполнить линеаризацию.

Если принять, что вблизи границы раздела фаз существует некоторая реакционная зона, в пределах которой концентрация активной части абсорбента B постоянна, а концентрация компонента A изменяется линейно с расстоянием от границы раздела, то приближенное решение при условии $C_{A,ж} \ll C_p$ имеет вид

$$\kappa = \frac{a}{\text{th} a}, \quad (6.296)$$

где

$$a = R \sqrt{1 - \frac{a-1}{M}}, \quad (6.297)$$

$$R = \frac{1}{\beta_{ж}} \sqrt{D_A K C_{Bж}}, \quad (6.298)$$

$$M = \frac{C_{Bж}}{\pi C_p} \frac{D_B}{D_A}. \quad (6.299)$$

В уравнениях (6.298), (6.299) C_p — концентрация компонента A у границы раздела фаз; $C_{Bж}$ — концентрация несвязанной активной части абсорбента B в основной массе жидкости.

Описание структуры потоков фаз в аппарате и алгоритмы расчета стационарных режимов работы абсорберов. В большинстве случаев абсорбцию проводят в аппаратах колонного типа. Это насадочные, тарельчатые, плочные и другие абсорберы. При моделировании абсорбции в таких аппаратах наибольшее распространение получили модель идеального вытеснения, ячеечная модель, диффузионная модель, диффузионная модель с застойными зонами.

Рассмотрим расчет процесса абсорбции на основе указанных моделей.

Модель идеального вытеснения. Составим уравнение материального баланса по передаваемому компоненту для элемента объема Sdz (рис. 6.14):

$$Lx - L(x + dx) - K_{Oy} a S dz (y - y^*) = 0 \quad (6.300)$$

или

$$L \frac{dx}{dz} = -K_{Oy} a S (y - y^*) \quad (6.301)$$

для начального условия

$$x = x_{вх} = 0 \quad \text{при} \quad z = H. \quad (6.302)$$

Знак минус в правой части уравнения соответствует падению концентрации в жидкой фазе вверх по колонне.

Аналогично в случае газовой фазы имеем

$$G \frac{dy}{dz} = -K_{Oy} a S (y - y^*) \quad (6.303)$$

для начального условия

$$y = y_{вх} \quad \text{при} \quad z = 0. \quad (6.304)$$

Кроме того, для любого элемента массообменного пространства абсорбера должно выполняться уравнение материального баланса

$$L dx = G dy. \quad (6.305)$$

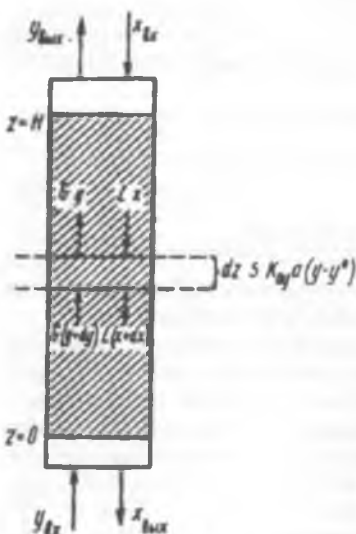


Рис. 6.14. Структура потоков фаз в абсорбере для модели идеального вытеснения

Для получения замкнутого математического описания процесса абсорбции в аппарате колонного типа запишем условие общего материального баланса

$$L(x_{\text{вмх}} - x_{\text{вх}}) = G(y_{\text{вх}} - y_{\text{вмх}}). \quad (6.306)$$

Остановимся теперь на расчете действующего абсорбера. В этом случае исходными данными являются $x_{\text{вх}}, y_{\text{вх}}, G$.

Определению подлежат следующие переменные: $x_{\text{вмх}}, y_{\text{вмх}}, L$ при ограничении $y_{\text{вмх}} \leq y_{\text{вмх}}^{\text{зад}}$.

1. Задают $x_{\text{вмх}}, L$.
2. Оценивают $K_{Oy}a$ и y^* .
3. Рассчитывают $y(z + \Delta z)$ по уравнению (6.303).
4. Рассчитывают $x(z + \Delta z)$ по уравнению (6.305).
5. Проверяют условие $z \geq H$. Если оно выполняется, то переходят к п. 7.
6. Рассчитывают $z = z + \Delta z$ и переходят к п. 2.
7. Корректируют $x_{\text{вмх}}$ по уравнению (6.306).
8. Проверяют условие $|x_{\text{вмх}}^{(k+1)} - x_{\text{вмх}}^{(k)}| < \epsilon$. Если оно выполняется, то переходят к п. 9. В противном случае переходят к п. 2 при $z=0$ и $x_{\text{вмх}}^{(k+1)}$.
9. Проверяют условие $y_{\text{вмх}} > y_{\text{вмх}}^{\text{зад}}$. Если оно выполнено, то расчет оканчивают и выводят результаты. В противном случае корректируют расход абсорбента L и переходят к п. 2 при $z = 0$.

При проектном расчете абсорбера исходными данными являются: $x_{\text{вх}}, y_{\text{вх}}, G, y_{\text{вмх}}^{\text{зад}}$. Определению подлежат: $x_{\text{вмх}}, y_{\text{вмх}}, L_{\text{опт}}, D_{\text{кпн}}, H_{\text{опт}}$.

Алгоритм расчета абсорбера:

1. Задают высоту абсорбера H, L .
2. Рассчитывают $x_{\text{вмх}}, y_{\text{вмх}}$ по алгоритму проверочного расчета (п. 1-8).
3. Проверяют условие $y_{\text{вмх}} \leq y_{\text{вмх}}^{\text{зад}}$. Если оно не выполнено, то пересчитывают H, L и переходят к п. 2.
4. По свойствам системы оценивают скорость в точке инверсии фаз

$$W_{\text{инв}} = f(y, \gamma_{\text{г}}, \gamma_{\text{ж}}, \mu_{\text{ж}}, \mu_{\text{г}}, L, G).$$

5. Рассчитывают реальную скорость газа

$$W_{\text{г}} = (0,85 \div 1,0) W_{\text{инв}}.$$

6. Рассчитывают диаметр колонны

$$D_{\text{к}} = \sqrt{\frac{4G}{\pi W_{\text{г}}}}.$$

7. Оценивают приведенные затраты на проект абсорбера:

Пр. 3 = ЭЗ + КЗЕ_н.

8. Выводят результаты расчета $D_k, H_k, y_{вых}^{расч}, L, x_{вых}$.

Ячеистая модель. Согласно этой модели, абсорбер представляют в виде ряда последовательно соединенных ячеек. Запишем систему уравнений математического описания.

Уравнение баланса по передаваемому компоненту для жидкой фазы (для ячейки i):

$$L(x_{i+1} - x_i) = - \frac{H_k}{N_{яч}} SK_{Oy} a (y_i - y_i^*) \quad (6.307)$$

(нумерация ячеек снизу вверх).

Уравнение баланса по передаваемому компоненту для газовой фазы:

$$G(y_i - y_{i-1}) = - \frac{H_k}{N_{яч}} SK_{Oy} a (y_i - y_i^*). \quad (6.308)$$

Общее уравнение баланса для i -й ячейки:

$$L(x_{i+1} - x_i) = G(y_i - y_{i-1}). \quad (6.309)$$

(Отметим, что из последних трех уравнений только два линейно независимы.)

Записывая аналогичные уравнения для всех N ячеек (предполагается, что число ячеек определено ранее), получаем систему $2N$ уравнений с $2N$ неизвестными составами x_i и y_i . Решение полученной системы уравнений (при $K_{Oy} a = \text{const}$ и $y^* = Kx$ — линейной) позволяет определить выходные концентрации потоков $x_{вых}$ и $y_{вых}$.

Отметим, что для расчета коэффициентов массопередачи $K_{Oy} a$, массотдачи β_x, β_y и равновесных значений y^* в большинстве случаев используют эмпирические зависимости. Например,

$$Nu_r = 0,0315 \frac{d_3}{d_{сш}} Re_r^{0,8} Pr_r^{2/3} (1 + f), \quad (6.310)$$

где f — фактор гидродинамического состояния поверхности раздела; $d_{сш}$ — эквивалентный диаметр стандартной насадки (ей соответствуют кольца Рашига с диаметром и высотой, равными 25 мм).

$$Nu_{ж} = 0,23 \frac{d_3}{d_{сш}} Re_{ж}^{0,6} Pr_{ж}^{2/3} (1 + f), \quad (6.311)$$

$$Nu = \frac{Kl}{D}. \quad (6.312)$$

Диффузионная модель. Составим уравнение баланса по передаваемому компоненту для выделенного элемента dz по жидкой фазе (рис. 6.15):

$$uH\gamma xS + D_{ж} H\gamma \frac{d}{dz} (x + dx)S - uH\gamma (x + dx)S - D_{ж} H\gamma \frac{dx}{dz} S + K_{Oy} aH(y - y^*)Sdz = 0, \quad (6.313)$$

$$D_{ж} H\gamma \frac{d}{dz} dxS - uH\gamma Sdx + K_{Oy} aHSdz(y - y^*) = 0. \quad (6.314)$$

Разделив на dz , получаем

$$D_{ж} H\gamma S \frac{d^2 x}{dz^2} - uH\gamma S \frac{dx}{dz} + K_{Oy} aHS(y - y^*) = 0. \quad (6.315)$$

Граничные условия имеют вид

$$-ux + D_{ж} \frac{dx}{dz} = 0 \text{ при } z = l; \quad (6.316)$$

$$\frac{dx}{dz} = 0 \text{ при } z = 0, \quad (6.317)$$

(при записи условия (6.316) положено $x_{вх} = 0$).

Запишем общее уравнение материального баланса для выделенного элемента dz :

$$Ldx = Gdy. \quad (6.318)$$

Для оценки коэффициента массопередачи $K_{Oy} a$ и равновесного состава y^* используют уже рассмотренные нами эмпирические соотношения. Таким образом, получают сокращенную систему уравнений математического описания процесса абсорбции. Эта система представляет собой краевую задачу, решение которой проводится методом факторизации (прогонки).

Решение диффузионных уравнений методом факторизации (прогонки).

Рассмотрим уравнение диффузионной модели

$$D_l \frac{d^2 x}{dz^2} - u \frac{dx}{dz} + K(x) = 0 \quad (6.319)$$

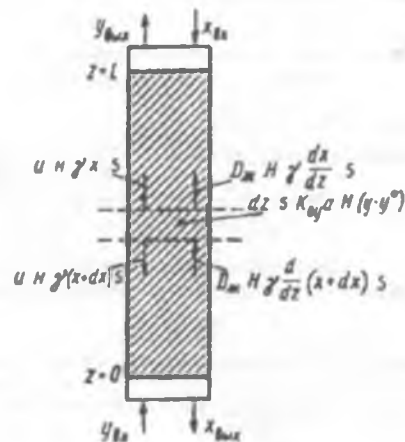


Рис. 6.15. Структура потоков фаз в абсорбере для диффузионной модели

$$z_0 \quad z_1 \quad z_2 \quad z_3 \quad \dots \quad z_{N-1} \quad z_N \quad z_{N+1} \quad z$$

Рис. 6.16. Выбор системы узлов на оси z

со следующими граничными условиями (по Дунквертсу):

$$m(x - x_{\text{вх}}) = D_l \frac{dx}{dz} \quad \text{при } z = 0, \quad (6.320)$$

$$\frac{dx}{dz} = 0 \quad \text{при } z = H. \quad (6.321)$$

В уравнении (6.319) x — концентрация вещества; z — координата вдоль направления движения потока; D_l — коэффициент диффузии (продольного перемешивания); m — скорость; $K(x)$ — член, отражающий приход либо уход вещества за счет межфазного переноса.

Разобьем ось z от 0 до H на N узлов (рис. 6.16). Представим дифференциальное уравнение второго порядка (6.319) в конечно-разностном виде. Для этого провозведем: первого и второго порядка будем аппроксимировать следующими выражениями:

$$\frac{d^2x}{dz^2} \approx \frac{x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1}}{\Delta z^2}, \quad (6.322)$$

$$\frac{dx}{dz} \approx \frac{x_i - x_{i-1}}{\Delta z}. \quad (6.323)$$

Тогда исходное дифференциальное уравнение в i -м узле может быть представлено в виде

$$a_i x_{i+1} + b_i x_i + c_i x_{i-1} = f_i \quad (1 \leq i \leq N), \quad (6.324)$$

где a_i, b_i, c_i, f_i — некоторые коэффициенты.

Значения функции x в двух соседних узлах связаны соотношением

$$x_i = a_i x_{i+1} + \beta_i \quad (1 \leq i \leq N), \quad (6.325)$$

где a_i и β_i — прогоночные коэффициенты.

Запишем соотношение (6.325) для $(i-1)$ -го узла

$$x_{i-1} = a_{i-1} x_i + \beta_{i-1} \quad (6.326)$$

и подставим в уравнение (6.324). Тогда после приведения подобных членов получим

$$x_i = \frac{a_i}{b_i - c_i a_{i-1}} x_{i+1} + \frac{-f_i + c_i \beta_{i-1}}{b_i - c_i a_{i-1}}. \quad (6.327)$$

Сравнивая выражения (6.325) и (6.327), получим следующие рекуррентные соотношения для прогоночных коэффициентов a_i и β_i :

$$a_i = \frac{a_i}{b_i - a_{i-1} c_i}, \quad (6.328)$$

$$\beta_i = \frac{-f_i + c_i \beta_{i-1}}{b_i - c_i a_{i-1}}. \quad (6.329)$$

Теперь для расчета прогоночных коэффициентов необходимо оценить их значения в нулевом узле. Используем для этого первое граничное условие

$$u(x - x_{\text{нх}}) = D_i \frac{dx}{dz} \quad \text{при } z = 0 \quad (6.330)$$

или в разностном виде

$$u(x_1 - x_{\text{нх}}) = D_i \frac{x_1 - x_0}{\Delta z} \quad \text{при } z = 0. \quad (6.331)$$

Отсюда

$$x_0 = \left(1 - \frac{u \Delta z}{D_i}\right) x_1 + \frac{u \Delta z x_{\text{нх}}}{D_i}. \quad (6.332)$$

Запишем соотношение (6.326) для первого узла ($i = 1$):

$$x_0 = a_0 x_1 + \beta_0. \quad (6.333)$$

Сравнивая уравнения (6.332) и (6.333), получаем

$$a_0 = 1 - \frac{u \Delta z}{D_i}. \quad (6.334)$$

$$\beta_0 = \frac{u \Delta z x_{\text{нх}}}{D_i}. \quad (6.335)$$

Таким образом, используя соотношения (6.328), (6.329), (6.334), (6.335), нетрудно найти значения прогоночных коэффициентов во всех узлах, начиная с первого (прямая прогонка). Далее, прежде чем найти значения искомой функции x в выделенных узлах по уравнению (6.326), следует определить x_{N+1} . Будем использовать для этого второе граничное условие

$$\frac{dx}{dz} = 0 \quad \text{при } z = H \quad (6.336)$$

или в разностном виде

$$\frac{x_{N+1} - x_N}{\Delta z} = 0 \quad \text{при } z = H. \quad (6.337)$$

Отсюда

$$x_N = x_{N+1}. \quad (6.338)$$

Запишем соотношение (6.326) для N -го узла:

$$x_N = a_N x_{N+1} + \beta_N. \quad (6.339)$$

Тогда из уравнений (6.338), (6.339) следует

$$x_{N+1} = \frac{\beta_N}{1 + a_N}. \quad (6.340)$$

Теперь последовательно подставляя значения x в уравнение (6.326), найдем значения искомой функции во всех узлах.

Из изложенного вытекает следующий алгоритм решения уравнений диффузионной модели с граничными условиями по Дунквертсу:

1. Задают число узлов разбиения N .
2. Рассчитывают Δz , a_i , b_i , c_i ($1 \leq i \leq N$).
3. Рассчитывают значения прогоночных коэффициентов a_0 и β_0 (уравнения (6.334) и (6.335)).

4. Определяют прогоночные коэффициенты a_i и b_i ($1 \leq i \leq N$) по уравнениям (6.328), (6.329) (прямая прогонка).

5. Рассчитывают значение функции в $(N+1)$ -м узле (уравнение (6.340)).

6. Определяют значения искомой функции x_i ($1 \leq i \leq N$) в узлах разбиения по уравнению (6.326) (обратная прогонка).

Отметим, что достаточным условием сходимости решения в методе прогонки является следующее соотношение между коэффициентами разностного уравнения (6.324):

$$|b_i| \geq |a_i| + |c_i| \quad (1 \leq i \leq N). \quad (6.341)$$

Поэтому метод применим лишь для задач, в которых выполнено условие (6.341).

Описание нестационарной абсорбции в насадочной колонне. Рассмотрим ранее модели процесса абсорбции относились к стационарному случаю. В нестационарных условиях особую важность приобретает учет распределенности в пространстве и во времени основных гидродинамических параметров процесса: удерживающей способности, расхода жидкости в колонне, перепада давления. Многочисленными экспериментальными исследованиями было показано существование продольного перемешивания и застойных областей в насадочных абсорберах. В связи с этим модель абсорбера должна также отражать неравномерность распределения элементов потока в аппарате по времени пребывания и наличие взаимного обмена между газовой фазой, проточной зоной потока жидкости и застойной зоной потока жидкости с количественным выражением интенсивности обменных процессов.

Динамическая удерживающая способность абсорбера по жидкости H_1 ($\text{м}^3/\text{м}^3$), относительный объем застойных зон в системе и расход жидкости по колонне L в условиях нестационарного режима двухфазного потока в аппарате являются функциями времени t и координаты z в продольном направлении: $H_1 = H_1(t, z)$, $L = L(t, z) = u_0 F H_1(t, z)$, где u_0 — средняя скорость распространения вдоль колонны фронта гидродинамического возмущения; F — площадь поперечного сечения аппарата.

Если принять, что продольное перемешивание в жидкой и газовой фазах характеризуются коэффициентами продольного перемешивания D_1 и D_2 , а скорость обмена веществом между газовой фазой и проточной зоной потока жидкости — коэффициентом K_v , между проточной зоной и застойной зоной потока жидкости коэффициентом — K_1 и между застойной зоной и газовой фазой — коэффициентом K_2 , то уравнения сохранения массы вещества в жидкой и газовой фазах запишутся в виде

$$\begin{aligned} & FD_1 H_1(t, z) \frac{\partial^2 x_1}{\partial z^2} + L(t, z) \frac{\partial x_1}{\partial z} + K_v F (y - y^*) - \\ & - K_1 F (x_1 - x_2) = FH_1(t, z) \frac{\partial x_1}{\partial t}, \\ & FD_2 [F_c - H(t, z)] \frac{\partial^2 y}{\partial z^2} - G \frac{\partial y}{\partial z} - K_v F (y - y^*) - \end{aligned} \quad (6.342)$$

$$-K_2 F(y - y_{33}^*) = F[F_c - H(t, z)] \frac{\partial y}{\partial t}. \quad (6.343)$$

Здесь x, y — соответственно концентрация передаваемого вещества в жидкости и газе; G — расход газа по колонне; F_c — свободный объем насадки; индексы "1" и "2" относятся к проточной и застойным зонам потока жидкости; y^* — равновесный состав газа.

Уравнения (6.342), (6.343) должны быть дополнены уравнением, описывающим динамику распространения фронта гидродинамического возмущения в системе (возмущения по расходу жидкости):

$$D_1 \frac{\partial^2 H_1(t, z)}{\partial z^2} - u_0 \frac{\partial H_1(t, z)}{\partial z} = \frac{\partial H_1(t, z)}{\partial t} \quad (6.344)$$

и уравнением баланса массы для застойной зоны потока жидкости, обменивающейся веществом как с проточной зоной потока жидкости, так и с газовой фазой:

$$K_1(x_1 - x_2) + K_2(y - y_{33}^*) = H_2 \frac{\partial x_2}{\partial t}. \quad (6.345)$$

Если нестационарный процесс абсорбции протекает в стационарной гидродинамической обстановке, а источниками нестационарности служат только возмущения по составу потоков, то $H_1(t, z) = \text{const}$; следовательно, $\partial H_1 / \partial z = \partial H_1 / \partial t = 0$ и система уравнений (6.342) — (6.345) приводится к виду

$$FD_1 H_1 \frac{\partial^2 x_1}{\partial z^2} + L \frac{\partial x_1}{\partial z} + K_v F(y - y^*) - K_1 F(x_1 - x_2) = FH_1 \frac{\partial x_1}{\partial t}, \quad (6.346)$$

$$FD_2 [F_c - H] \frac{\partial^2 y}{\partial z^2} - G \frac{\partial y}{\partial z} - K_v F(y - y^*) - K_2 F(y - y_{33}^*) = F(F_c - H) \frac{\partial y}{\partial t}, \quad (6.347)$$

$$K_1(x_1 - x_2) + K_2(y - y_{33}^*) = H_2 \frac{\partial x_2}{\partial t}. \quad (6.348)$$

При условии полной стационарности процесса абсорбции

$$x_1 = x_2; \quad \frac{\partial x_1}{\partial t} = \frac{\partial x_2}{\partial t} = \frac{\partial y}{\partial t} = 0; \quad \frac{\partial H_1}{\partial z} = \frac{\partial H}{\partial t} = 0 \quad (6.349)$$

и система уравнений (6.342) — (6.345) принимает обычный вид:

$$D_1 \frac{\partial^2 x_1}{\partial z^2} + u_0 \frac{\partial x_1}{\partial z} + K_v (y - y^*) = 0, \quad (6.350)$$

$$D_2 \frac{\partial^2 y}{\partial z^2} + u_g \frac{\partial y}{\partial z} - K_v (y - y^*) = 0. \quad (6.351)$$

В уравнениях (6.342) — (6.345) $H(t, z) = H_1(t, z) + H_2$.

Таким образом, система (6.342) — (6.345) представляет собой замкнутую систему уравнений относительно четырех неизвестных: концентрации

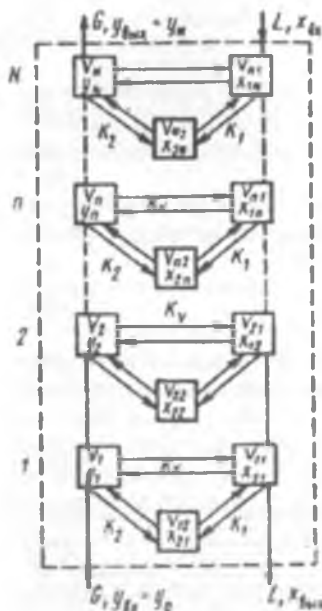


Рис. 6.17. Структурная схема ячеечной модели с замкнутой цепью обменных процессов для нестационарного процесса абсорбции в насадочной колонне

растворенного вещества в проточной части жидкой фазы $x_1(t, z)$, концентрации в застойной зоне аппарата $x_2(t, z)$, концентрации растворенного вещества в газовой фазе $y(t, z)$ и динамической удерживающей способности аппарата $H_1(t, z)$. Как видно из структуры системы (6.342) – (6.345), совместное решение ее уравнений сопряжено со значительными трудностями. С точки зрения нахождения численных результатов удобнее перейти от системы (6.342) – (6.345), совместное решение ее уравнений сопряжено со значительными трудностями. С точки зрения нахождения численных результатов удобнее перейти от системы (6.342) – (6.345) к эквивалентной симметричной ячеечной

модели, учитывающей распределенность в пространстве и времени объемов ячеек:

$$hH_1(t, z) \frac{dx_{1n}}{dt} = L(t, z)(x_{1, n+1} - x_{1n}) + K_v h(y_n - y_n^*) + K_1 h(x_{2n} - x_{1n}), \quad (6.352)$$

$$h[F_c - H(t, z)] \frac{dy_n}{dt} = G(y_{n-1} - y_n) - K_v h(y_n - y_n^*) - K_2 h(y_n - y_{n+1}^*), \quad (6.353)$$

$$H_2 h \frac{dx_{2n}}{dt} = K_2 h(y_n - y_{n+1}^*) - K_1 h(x_{2n} - x_{1n}), \quad (6.354)$$

$$D_1 \frac{\partial^2 H_1(t, z)}{\partial z^2} - u_0 \frac{\partial H_1(t, z)}{\partial z} + \frac{\partial H_1(t, z)}{\partial t} = 0. \quad (6.355)$$

Структурная схема ячеечной модели, отвечающая системе уравнений (6.352) – (6.355), представлена на рис. 6.17. Здесь x_{1n} , x_{2n} – концентрации растворенного вещества соответственно в проточной и застойной части n -й ячейки потока жидкости; y_n – концентрация в n -й ячейке потока газа; $V_{n1} = hH_1(t, z)F$ – переменный объем проточной части n -й ячейки потока жидкости; $V_{2n} = hH_2F$ – объем застойной части n -й ячейки потока жидкости.

ти; $V_n = h [F_c - H(t, z)] F$ — переменный объем n -й ячейки потока газа; K_v, K_1, K_2 — коэффициенты массообмена замкнутой цепи обменных процессов между ячейками.

Отметим, что модель (6.352) — (6.355) включает как частный случай ячеечную модель. Так, если пренебречь распределенностью гидродинамических параметров по длине аппарата и во времени, а также влиянием застойной зоны, то система уравнений (6.352) — (6.355) сведется к нестационарной ячеечной модели:

$$H_L h \frac{dx_{1n}}{dt} = L(x_{1,n+1} - x_n) + K_v h (y_n - y_n^*), \quad (6.356)$$

$$H_G h \frac{dy_n}{dt} = G(y_{n-1} - y_n) + K_v h (y_n - y_n^*). \quad (6.357)$$

Система уравнений (6.352) — (6.355) представляет собой смешанную систему обыкновенных дифференциальных уравнений и уравнения с частными производными. Для решения этой системы удобно воспользоваться независимостью уравнения (6.355) от остальных уравнений. Решая это уравнение относительно искомой динамической удерживающей способности $H_1(t, z)$ для ступенчатого возмущения ΔH_1 на входе в аппарат, получим

$$H_1(t, z) = \Delta H_1 e^{\frac{u_0 z}{2D_1} \left\{ \frac{1}{2} e^{-\frac{u_0^2 z^2}{2D_1}} \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{z^2}{D_1 t}} - \sqrt{\frac{u_0^2 t}{4D_1}} \right) \right] + e^{\frac{u_0^2 z^2}{2D_1}} \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{z^2}{D_1 t}} + \sqrt{\frac{u_0^2 t}{4D_1}} \right) \right] \right\}} + H_{10}. \quad (6.358)$$

В соответствии с дискретной природой ячеечной модели (6.352) — (6.355) следует перейти от непрерывного по времени и длине характера распределения (6.358) к дискретному по длине и непрерывному по времени распределению объемов ячеек:

$$V_{n1} = h F H_{10}, \quad t < \frac{nh}{u_0}, \quad (6.359)$$

$$V_{n1}(t) = h F \Delta H_1 e^{\frac{u_0 n h}{2D_1} \left\{ \frac{1}{2} e^{-\frac{u_0 n h}{2D_1}} \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{n^2 h^2}{D_1 t}} - \sqrt{\frac{u_0^2 t}{4D_1}} \right) \right] + e^{\frac{u_0 n h}{2D_1}} \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{n^2 h^2}{D_1 t}} + \sqrt{\frac{u_0^2 t}{4D_1}} \right) \right] \right\}} + H_{10} F h, \quad t \geq \frac{nh}{u_0}, \quad (6.360)$$

где h — высота колонны, соответствующая одной ячейке.

Выражения (6.359), (6.360) означают, что весь объем n -й ячейки непрерывно изменяется во времени, начиная с момента $t = nh/u_0$ поступления на эту ячейку фронта гидродинамического возмущения.

Помимо характера распределения объемов ячеек для расчета динамики процесса абсорбции в насадочном аппарате с помощью модели (6.352)–(6.355) необходимо знать величины входящих в нее параметров: числа ячеек, коэффициента массопередачи K_V , а также коэффициентов обмена K_1 и K_2 .

Исходя из граничных условий для аппарата конечных размеров число ячеек N симметричной ячеечной модели (число ячеек по газовой фазе равно числу ячеек по жидкой фазе) определяется выражением

$$\frac{1}{N} = \frac{2}{Pe^2} (Pe + e^{-Pe} - 1). \quad (6.361)$$

Коэффициент обмена K_1 между проточными и застойными зонами жидкости рассчитывается по следующей эмпирической зависимости:

$$K_1 = 0,54 \cdot 10^{-18} \frac{L^{1,9} G}{d^{2,6}}. \quad (6.362)$$

Коэффициент обмена K_2 между газовой фазой и застойными зонами жидкости оценивается на основании следующих соображений. В соответствии с представлениями о межфазной турбулентности коэффициент массопередачи можно считать независимым от взаимодействия потоков фаз. Это приводит к тому, что в уравнениях массопередачи для двухфазных систем фактор гидродинамического состояния $f = 0$. При этом для расчета коэффициентов массопередачи в случае хорошо растворимых газов можно использовать уравнение

$$Nu_{\Gamma} = \beta_1 \frac{d_2}{d_{2c}} Re_{\Gamma}^n Pr_{\Gamma}^m, \quad (6.363)$$

а для плохо растворимых газов — уравнение

$$Nu_{ж} = \beta_2 \frac{d_2}{d_{2c}} Re_{ж}^p Pr_{ж}^q. \quad (6.364)$$

Остается определить коэффициент массопередачи K_V . Трудности в определении K_V состоят в том, что подавляющее большинство корреляций для K_V дано без учета продольного перемешивания в аппарате, т.е. исходя из модели идеального вытеснения. Непосредственно использовать эти данные в модели (6.352)–(6.355), учитывая неравномерность распределения элементов потока по времени пребывания в аппарате, нельзя, так как эти значения K_V не соответствуют принятой структуре модели (6.352)–(6.355). Таким образом, для расчета процесса по указанной модели необходима либо постановка соответствующих экспериментов по определению коэффициента K_V с учетом продольного перемешивания в колонне, либо применение специальной методики пересчета существующих экспериментальных данных, которая позволила бы ввести поправку в известные значения K_V на неидеальность модели структуры потоков в аппарате.

Для случая низких концентраций абсорбируемого компонента в газовой фазе и больших плотностей орошения можно приближенно оценить поправку в величине коэффициента K_V . Будем полагать, что коэффициент K_V , рассчитанный на основе модели идеального вытеснения, связан с коэффициентом массопередачи K_V , определяемым на основе ячеечной модели, соотношением

$$\bar{K}_V = \eta K_V, \quad (6.365)$$

где η — корректирующий множитель, подлежащий определению.

В принятых предположениях рабочая и равновесная линии близки к прямым и количество абсорбируемого компонента q , выраженное через среднелогарифмическую движущую силу, имеет вид

$$q = \bar{K}_V V \frac{(y_{вх} - y_{вх}^*) - (y_{вых} - y_{вых}^*)}{\ln \frac{y_{вх} - y_{вх}^*}{y_{вых} - y_{вых}^*}}. \quad (6.366)$$

Подставим вместо q в левую часть равенства (6.366) количество абсорбируемого компонента, выраженное через параметры ячеечной модели $q = G(y_0 - y_N)$. Тогда, учитывая соотношение (6.365), получим

$$\eta = \frac{y_0 - y_N}{\epsilon N} \frac{\ln \frac{(y_{вх} - y_{вх}^*)}{(y_{вых} - y_{вых}^*)}}{(y_{вх} - y_{вх}^*) - (y_{вых} - y_{вых}^*)}, \quad (6.367)$$

где $V = N \Delta V$, $\epsilon = K_V \Delta V / G$.

Покажем, что величина ϵ может быть приближенно выражена через известные параметры процесса. На основании уравнения материального баланса для n -й ячейки газовой фазы можно записать

$$y_n = \frac{y_{n-1} + \epsilon y_n^*}{1 + \epsilon}, \quad \frac{y_{n-1} - y_n^*}{y_n - y_n^*} = 1 + \epsilon \quad (6.368)$$

($n = 1, 2, \dots, N$).

При сделанных предположениях концентрация абсорбируемого компонента в жидкой фазе изменяется незначительно и для приближенного расчета равновесной концентрации в соотношениях (6.368) можно использовать среднюю концентрацию в жидкости по высоте колонны. На основании этого перейдем в указанных соотношениях к соответствующим приближенным равенствам, в которых будем полагать $y_n^* \approx y^* = \text{const}$ ($n = 1, 2, \dots, N$). Подставляя y_{n-1} в выражение (6.368) для y_n , последовательно при $n = 1, 2, \dots, N$ получаем

$$\frac{y_0 - y^*}{y_N - y^*} \approx (1 + \epsilon)^N, \quad (6.369)$$

откуда

$$\epsilon \approx \left(\frac{y_0 - y^*}{y_N - y^*} \right)^{\frac{1}{N}} - 1, \quad (6.370)$$

Подставляя уравнение (6.370) в выражение (6.367), получаем иско-
мое соотношение для корректирующего фактора η :

$$\eta \approx \frac{\ln [(y_0 - y^*)/(y_N - y^*)]}{N \left[\left(\frac{y_0 - y^*}{y_N - y^*} \right)^{1/N} - 1 \right]}. \quad (6.371)$$

Расчет таких параметров, как перепад давления $\Delta P_{г-ж}$, скорость га-
за в точке инверсии фаз $u_{инв}$, число Пекле Pe , производится по следующим
эмпирическим соотношениям:

Перепад давления на сухой насадке:

$$\Delta P_{г} = \lambda \frac{u_{г}^2 \gamma_{г}}{g F_c^3 d_3}. \quad (6.372)$$

Скорость газа в точке инверсии:

$$\lg \left(\frac{u_{инв}^2}{g F_c^3} \frac{\gamma_{г}}{\gamma_{ж}} \mu_{ж}^{0,16} \right) = A_1 - 1,75 \left(\frac{L}{G} \right)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{\gamma_{г}}{\gamma_{ж}} \right)^{1/8}. \quad (6.373)$$

Перепад давления на орошаемой насадке:

если

$$\Phi = \left(\frac{L}{G} \right)^{1,8} \left(\frac{\gamma_{г}}{\gamma_{ж}} \right) \left(\frac{\mu_{ж}}{\mu_{г}} \right)^{0,2} < 0,5, \quad (6.374)$$

то

$$\Delta P_{г-ж} = \Delta P_{г} (1 + C \Phi^{0,225}), \quad (6.375)$$

где

$$C = \exp \left(\frac{3u_{г}}{u_{инв}} - 0,853 \right) - 0,175; \quad (6.376)$$

если $\Phi > 0,5$, то

$$\Delta P_{г-ж} = \Delta P_{г} (1 - C \Phi^{0,525}), \quad (6.377)$$

где

$$C = \exp \left(\frac{3u_{г}}{u_{инв}} - 0,853 \right) + 1,39. \quad (6.378)$$

Динамическая удерживающая способность двухфазной системы ($H_{ж} + \Delta H$):

если $u_{г}/u_{инв} < 0,85$, то

$$\frac{\Delta H}{H_{ж}} = 13,2 \left(\frac{\Delta P_{г-ж}}{\gamma_{ж} l} \right)^{1,92}, \quad (6.379)$$

где ΔH — прирост динамической удерживающей способности в двухфазной
системе по сравнению с величиной динамической удерживающей способнос-
ти $H_{ж}$ при отсутствии противотока газа;

если $u_{г}/u_{инв} > 0,85$, то

$$\frac{\Delta H}{H_{ж}} = 7,12 \cdot 10^3 \left(\frac{\Delta P_{г-ж}}{\gamma_{ж} l} \right)^{6,35}, \quad (6.380)$$

где при $Ga = \frac{d_3^3 g \rho^2}{\mu^2} < 4 \cdot 10^4$

$$H_{ж} = 0,183 \left(\frac{d_3 L \rho}{\mu} \right)^{0,74} \left(\frac{d_3^3 g \rho^2}{\mu^2} \right)^{-0,256} a d_3, \quad (6.381)$$

при $Ga > 4 \cdot 10^4$

$$H_{ж} = 3 \left(\frac{d_3 L \rho}{\mu} \right)^{0,74} \left(\frac{d_3^3 g \rho^2}{\mu^2} \right)^{-0,52} a d_3. \quad (6.382)$$

Число Пекле Pe :

если $0,86 \left(\frac{u_{г}}{u_{инв}} \right) \left(\frac{d_3 L \rho}{\mu} \right)^{0,107} < 0,85$, то

$$Pe = 4,75 \left(\frac{u_{г}}{u_{инв}} \right)^{1,4} \left(\frac{d_3 L \rho}{\mu} \right)^{0,15} \left(\frac{d_3^3 g \rho^2}{\mu^2} \right)^{0,17}; \quad (6.383)$$

если $0,86 \left(\frac{u_{г}}{u_{инв}} \right) \left(\frac{d_3 L \rho}{\mu} \right)^{0,107} > 0,85$, то

$$Pe = 2,25 \cdot 10^{-3} \left(\frac{u_{г}}{u_{инв}} \right)^{-3,3} \left(\frac{d_3 L \rho}{\mu} \right)^{-0,353} \left(\frac{d_3^3 g \rho^2}{\mu^2} \right)^{0,29}. \quad (6.384)$$

Относительный объем застойных зон H_2 определяется следующим об-
разом:

если $0,3 < \frac{u_{г}}{u_{инв}} < 0,85$, то

$$H_2 = 6,44 \cdot 10^{-2} \left(\frac{u_{г} - 0,3u_{инв}}{u_{инв}} \right) + \frac{0,185}{d_3 G}; \quad (6.385)$$

если $u_{г}/u_{инв} > 0,85$, то

$$H_2 = \frac{0,258 \cdot 10^{-3}}{d_3} - 0,17 \left(\frac{u_{г} - 0,82u_{инв}}{u_{инв}} \right). \quad (6.386)$$

В уравнениях (6.372) — (6.386) λ — коэффициент сопротивления; $u_{г}$ —
скорость газа, отнесенная к полному сечению колонны, м/с; $\gamma_{г}$, $\gamma_{ж}$ — удель-

ный вес газа, жидкости, кг/м^3 ; d_2 — эквивалентный диаметр насадки, м; F_c — свободный объем насадки; A_1 — константа, определяемая гидродинамическим режимом; $\mu_r, \mu_{ж}$ — вязкость газа и жидкости, сПз (в уравнениях (6.381)–(6.384) μ — вязкость жидкости в кг/(м·с)); $\rho_r, \rho_{ж}$ — плотность газа и жидкости, кг/м^3 ; $Ga = \frac{d_2^3 g \rho^2}{\mu^2}$ — числа Галилея.

Блок-схема алгоритма расчета динамики процесса абсорбции приведена на рис. 6.18. В соответствии с данной блок-схемой расчет начинают с ввода исходной информации: величин нагрузок по фазам, значений конструктивных параметров колонны и насадки, физико-химических свойств фаз. Далее рассчитывают профиль распределения концентраций по высоте

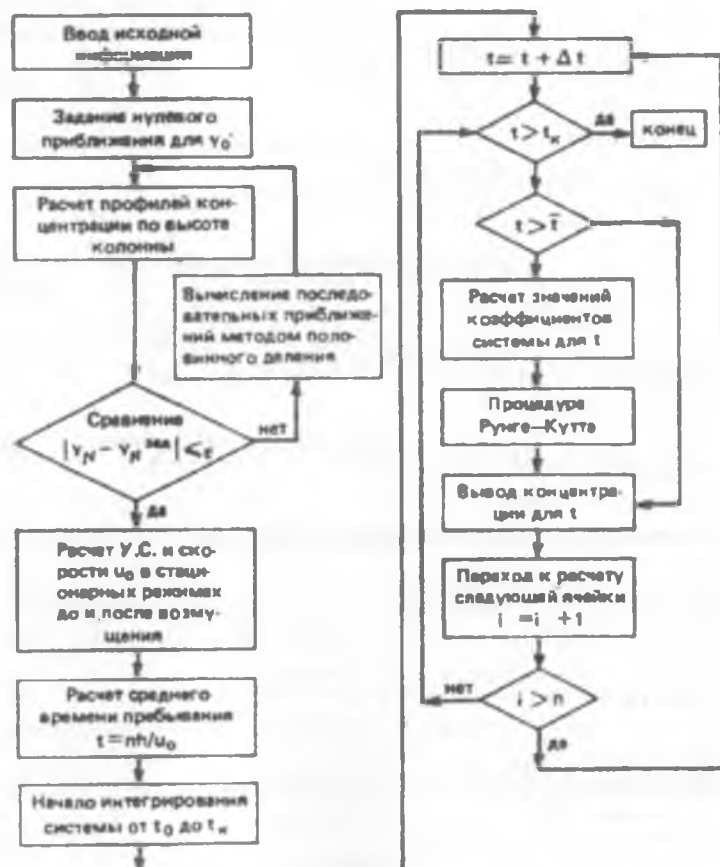


Рис. 6.18. Блок-схема алгоритма расчета динамики процесса абсорбции в насадочной колонне

колонны в стационарном состоянии, которое принимают за начало отсчета при количественном анализе динамических характеристик. Этот расчет производят по алгебраическим уравнениям, вытекающим из системы (6.352) – (6.355), в которой производные по времени полагают равными нулю, а также предполагают, что в стационарном состоянии значения концентрации абсорбируемого компонента в проточных и застойных зонах одинаковы. Так как начальные концентрации задаются на противоположных концах колонны, то расчет стационарного состояния носит итерационный характер. Итерации осуществляют методом половинного деления, где варьируемой переменной является концентрация абсорбируемого компонента в газовой фазе на выходе из колонны. В качестве условия окончания итерационной процедуры используют неравенство

$$|y(N)_{\text{расч}} - y_{\text{зад. вых}}| \leq \alpha, \quad (6.387)$$

где α – заданная точность расчета.

Расчет нестационарного режима процесса абсорбции сводится к интегрированию системы уравнений (6.352) – (6.355) при ступенчатом изменении расхода жидкости относительно его значения в стационарном состоянии. Интегрирование осуществляют методом Рунге–Кутты с автоматическим выбором шага интегрирования. В момент подачи возмущения динамическая удерживающая способность первой ячейки изменяется в соответствии с уравнением (6.358). При этом удерживающую способность по газу определяют по формуле $H_G = F_G - (H_1 + H_2)$. Одновременно производят пересчет всех коэффициентов обмена замкнутой обменной цепи на новые нагрузки по формулам (6.362) – (6.365). По истечении времени $t = h/u_0$ от момента подачи возмущения на первую ячейку аналогичную процедуру повторяют для второй ячейки и т.д.

На рис. 6.19 представлены результаты сравнения экспериментальных и расчетных динамических характеристик лабораторного насадочного аппарата (диаметр 147 мм, высота 1 м, насадка – кольца Рашига 15x15 мм). На этом рисунке приведены два типа расчетных характеристик: кривая 1 изображает переходный процесс системы, рассчитанный по модели (6.352) – (6.356); кривая 2 – переходный процесс, рассчитанный по ячеечной модели, структура которой не учитывает распределенности гидродинамической обстановки в аппарате и эффектов обмена между проточными и застойными зонами в жидкости. Подача возмущения по расходу жидкости при расчете кривой 2 осуществляется путем мгновенного изменения плотности орошения по всей длине колонны. Как видно из рисунка, допущения о постоянстве гидродинамических параметров по колонне, принятые в последней модели, являются источником существенных расхождений между моделями.

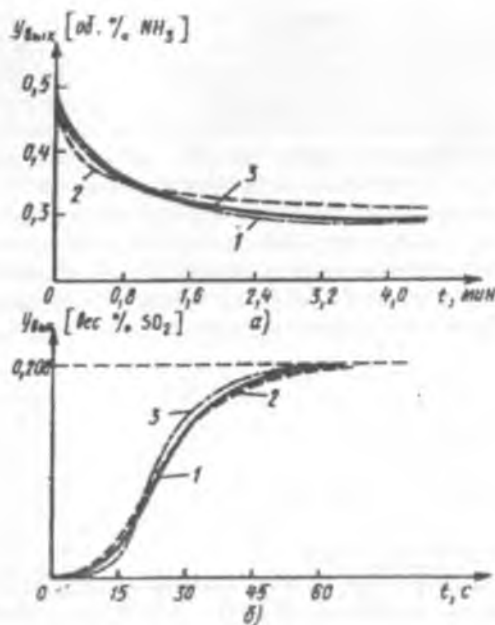


Рис. 6.19. Сравнение расчетных и экспериментальных динамических характеристик лабораторного насадочного аппарата при возмущении по расходу жидкости: а — система $\text{NH}_3 - \text{H}_2\text{O}$; $L_0 = 2590 \text{ кг}/(\text{м}^2 \cdot \text{ч})$; $G_0 = 2630 \text{ кг}/(\text{м}^2 \cdot \text{ч})$; $\Delta L = 1130 \text{ кг}/(\text{м}^2 \cdot \text{ч})$; $u_T/u_{\text{пл}} = 0,57$; $y_{\text{вх}} = 2,9 \text{ об. \% NH}_3$; 1 — расчет по модели (6.358)–(6.361); 2 — расчет без учета распределенности гидродинамических параметров; 3 — экспериментальные данные; б — система $\text{SO}_2 - \text{H}_2\text{O}$; $L_0 = 3950 \text{ кг}/(\text{м}^2 \cdot \text{ч})$; $G_0 = 3020 \text{ кг}/(\text{м}^2 \cdot \text{ч})$; $\Delta L = 1100 \text{ кг}/(\text{м}^2 \cdot \text{ч})$; $y_{\text{вх}} = 0,286 \text{ вес. \% SO}_2$; 1 — экспериментальные данные; 2 — расчет по модели; 3 — расчет без учета распределенности параметров

§ 6.7. Экстракция в системе жидкость—жидкость

Экстракция — это массообменный процесс перераспределения компонентов между двумя частично смешиваемыми жидкими фазами, происходящий в ходе их контактирования на специальных контактных устройствах. Обычно фазу, из которой извлекается целевой компонент, называют *рафинатом*, а фазу, в которую компонент попадает, — *экстрактом*.

В зависимости от конструкции экстракционные аппараты весьма разнообразны. Это насадочные, тарельчатые, полочные, роторно-дисковые, смешительно-отстойные и т.п. экстракторы. Однако несмотря на такое разнообразие общее математическое описание, рассматриваемое ниже, пригодно практически для всех упомянутых типов экстракторов.

Экстракция в системе жидкость — жидкость представляет собой процесс, протекающий с участием двух взаимонерастворимых или ограниченно растворимых фаз, в результате взаимодействия которых получают экстракт — раствор извлеченных веществ в экстрагенте и рафинат — остаточный исходный раствор, из которого с той или иной степенью полноты удалены экстрагируемые компоненты. Полученные жидкие фазы отделяют друг от друга отстаиванием, иногда центрифугированием или другими способами. После этого производят извлечение целевых продуктов из экстракта и регенерацию экстрагента из рафината.

Основным достоинством процесса экстракции по сравнению с другими процессами разделения жидких смесей (ректификацией, выпариванием и др.) является низкая рабочая температура процесса (15–20 °C). При этом отпадает необходимость в затратах энергии на испарение раствора. Вместе с тем применение в процессах экстракции дополнительного компонента — экстрагента и необходимость его регенерации приводит к усложнению аппаратурного оформления и удорожанию процесса экстракции.

Равновесие между жидкими фазами. Описание равновесия жидкость — жидкость на строгой теоретической основе затрудняется недостаточной разработанностью теории растворов. Известные способы описания равновесия можно разделить на две группы: методы описания, основанные на установлении простых эмпирических соотношений между составами равновесных фаз, и полумпирические методы, основанные на основных термодинамических условиях равновесия.

Применение первой группы методов сопряжено со значительным объемом экспериментальной работы и, что более важно, получаемые при этом равновесные соотношения обладают малой прогнозирующей способностью, т.е. справедливы только в области проведения эксперимента.

Данное обстоятельство обусловило значительно большее распространение второй группы методов. Ранее уже было рассмотрено составление описания равновесия жидкость — жидкость с использованием данных методов (см. § 6.2). Здесь мы остановимся лишь на некоторых особенностях описания экстракционного равновесия.

Если экспериментальная равновесная зависимость близка к линейной, что бывает в области очень низких концентраций, то можно пренебречь зависимостью отношения коэффициентов активности от состава и определять соотношение равновесных концентраций C_1^G и C_1^L через коэффициент распределения D_1 , постоянный в рабочем диапазоне изменения концентраций:

$$C_1^L = D_1 C_1^G. \quad (6.388)$$

Использование линейного соотношения (6.388) чрезвычайно упрощает расчет процесса экстракции, так как в этом случае приходится иметь дело с линейными уравнениями (предполагается, что скорость массопердачи также определяется линейным выражением).

Однако системы с линейными равновесными зависимостями редко встречаются на практике экстракционного разделения, для которого ха-

рактен подбор резко отличающихся по свойствам растворителей, в одном из которых или в обоих может происходить образование гидратов или сольватов экстрагируемого вещества, образование ассоциатов, диссоциации компонентов и другие химические взаимодействия, что приводит к существенному отклонению состояния растворов от идеальности и к нелинейной равновесной зависимости.

Одна из возможностей описания нелинейных равновесных зависимостей заключается в использовании формальных соотношений между составами фаз, например, сплайн-интерполяции, полиномиальной аппроксимации. В частности, при описании распределения одного компонента между двумя несмешивающимися растворителями используют полиномиальные уравнения различных степеней, имеющие вид

$$C_i^L = b_0 + b_1 C_i^G + b_2 (C_i^G)^2 + \dots + b_n (C_i^G)^n, \quad (6.389)$$

где $b_0, b_1, \dots, b_n$ — коэффициенты, определяемые по экспериментальным данным.

Показатель степени n может быть заранее задан, исходя из формы экспериментальной равновесной зависимости. Для определения коэффициентов b_j в уравнении (6.389) используют метод наименьших квадратов.

Описание кинетики массопередачи в экстракторах с внешним подводом энергии. Механизм массопередачи в системах жидкость — жидкость весьма сложен и недостаточно изучен. В связи с этим для определения параметров, характеризующих скорость массопередачи, приходится использовать чисто эмпирические соотношения или приближенные модели, существенно упрощающие реальную картину.

В настоящее время имеется большое число эмпирических корреляций для расчета коэффициентов массопередачи или других параметров (высота единицы переноса, высота эквивалентной теоретической ступени), характеризующих скорость массопередачи в экстракторах. Несмотря на попытки распространить эти уравнения на возможно более широкий диапазон размеров аппарата, гидродинамических условий и физических свойств системы, все они имеют весьма ограниченный диапазон применения и не обладают экстраполяционной способностью. Более общий характер имеют уравнения, полученные на основе упрощенного модельного представления механизма массопередачи. Пленочная теория массопередачи, теория проникновения Хигби, теория проникновения и обновления поверхности Данкверта разработаны в ряде случаев подтверждены экспериментально для систем с плоской границей раздела фаз. В этом случае одни и те же уравнения пригодны для описания процесса в обеих фазах. Анализ процессов массопередачи на основе представления о межфазной турбулентности позволяет в явной форме через величину фактора гидродинамического состояния выразить влияние подвода дополнительной энергии на скорость массопередачи. Этот подход может быть использован для исследования влияния ве-

личины подводимой энергии (перемешивание, вращение дисков, вибрация, пульсация и т.д.) на кинетику массопередачи и выбора оптимальной величины подводимой энергии.

Как уже отмечалось, общее сопротивление массопередаче может быть определено как сумма сопротивлений в жидких фазах и сопротивление поверхности раздела фаз. Применение формулы аддитивности позволяет в ряде случаев выделить фазу, сопротивление которой является лимитирующим, что значительно упрощает рассмотрение процесса.

В некоторых случаях сопротивление поверхности раздела фаз становится соизмеримым по величине с сопротивлениями жидких фаз. Это может происходить вследствие изменения температуры поверхности раздела благодаря различной теплоте растворения компонента в жидких фазах, адсорбции небольших количеств поверхностно-активных веществ, а также спонтанной межфазной турбулентности, химической реакции на поверхности раздела фаз и т.д. Это дополнительное сопротивление может быть учтено в виде дополнительного слагаемого в формуле аддитивности (6.81).

При описании массопередачи в процессе экстракции, когда одна жидкая фаза является сплошной, а вторая распределена в ней в виде капель, следует учитывать, что перенос вещества в каждой фазе имеет существенное отличие. Оно объясняется различием гидродинамических условий переноса массы внутри капли и в сплошной среде. Одним из важных факторов турбулизации сплошной фазы является движение частиц дисперсной фазы. Единственным источником конвекции внутри капли дисперсной фазы является трение между поверхностью капли и сплошной средой, возникающее в результате относительного движения фаз. В условиях стесненного движения капель дисперсной фазы в аппаратах, интенсифицированных подводом дополнительной энергии, на гидродинамические условия помимо указанных факторов влияют также соударения капель дисперсной фазы между собой и с элементами внутренней конструкции аппарата, приводящие к коалесценции и редиспергированию капель, а также вращательное и возвратно-поступательное движение системы в целом. В настоящее время не удается учесть и строго описать все указанные взаимодействия в объеме фаз, а также явления на границе раздела. Наиболее изученным является простейший случай массопередачи между единичной каплей и окружающей жидкостью. В этом случае получены уравнения для расчета частных коэффициентов массоотдачи по сплошной и дисперсной фазе при допущении о том, что сопротивление процессу массопередачи сосредоточено в одной из фаз.

Вид выражения для расчета коэффициента массопередачи зависит от принятого допущения о механизме переноса вещества. Если капли рассматриваются как твердые сферические частицы, перенос вещества в которых происходит только за счет молекулярной диффузии, то коэффициент массоотдачи по дисперсной фазе β_d можно найти из уравнения

$$\beta_d = \frac{2\pi^2 D_{12}}{3d_k}, \quad (6.390)$$

где D_d — коэффициент молекулярной диффузии в дисперсной фазе; d_k — диаметр капли.

Выражение (6.390) для коэффициента массоотдачи в капле применимо только для капель очень малого размера $d_k < 10^{-6}$ м и определяет нижний предел скорости массопередачи.

Для сферических капель с внутренней циркуляцией получено следующее выражение:

$$\beta_d = \frac{17,9 D_d}{d_k} \quad (6.391)$$

Экспериментальная проверка выражения (6.391) показала, что оно справедливо при $5 \cdot 10^{-6}$ м $< d_k < 3 \cdot 10^{-3}$ м.

Для расчета коэффициента массоотдачи в очень больших каплях, диаметром порядка $8 \cdot 10^{-3}$ м — $1,5 \cdot 10^{-2}$ м применима модель Хэндлоса и Бэрона, описывающая другой предельный случай, когда движение жидкости в капле полностью турбулентно, причем происходит по концентрическим окружностям. При выводе уравнения принято допущение о том, что в течение одного оборота происходит полное перемешивание жидкости в радиальном направлении между соседними линиями тока. Модель Хэндлоса и Бэрона учитывает зависимость скорости циркуляции жидкости в капле от скорости ее движения, поэтому окончательное выражение для коэффициента массоотдачи также включает скорость движения капли:

$$\beta_d = \frac{0,00375 U_0}{1 + \frac{\mu_d}{\mu_c}} \quad (6.392)$$

где U_0 — скорость осаждения или подъема капель; μ_d, μ_c — вязкость дисперсной и сплошной фаз. Эта модель соответствует верхнему пределу скорости массопередачи в дисперсной фазе.

В диапазоне размеров капель $3 \cdot 10^{-3}$ м $< d_k < 8 \cdot 10^{-3}$ м, когда существенными становятся эффекты осцилляции капель и отклонения от сферической формы (капли периодически осциллируют, принимая последовательно шарообразную и эллипсоидальную форму), но движение жидкости внутри капли не является полностью турбулентным, не применимо ни одно из перечисленных выражений для коэффициента массоотдачи в капле. В этом случае можно использовать метод Кольдербенка и Корчинского, который заключается в использовании выражения (6.391) с заменой коэффициента молекулярной диффузии на коэффициент турбулентной диффузии. Для ориентировочного определения коэффициента турбулентной диффузии можно использовать соотношение, полученное в результате сравнения выражений (6.390) и (6.392):

$$D'_d = 0,00057 Re'_d D_d \quad (6.393)$$

где D'_d — эффективный коэффициент диффузии; Re'_d — модифицированное число Пекле:

$$Re'_d = \frac{d_k U_0}{D_d (1 + \mu_d / \mu_c)} \quad (6.394)$$

Скорость массопередачи в сплошной фазе также зависит от структуры потоков в капле. Если капли ведут себя как твердые сферы, то для расчета коэффициента массоотдачи в сплошной фазе можно использовать корреляцию Штайнберга и Трейбала:

$$Sh_c = \frac{\beta_c d_k}{D_c} = Sh' + 0,347 (Re Sc_c^{0,5})^{0,62}, \quad (6.395)$$

$$Sh' = 2 + 0,569 (Gr_c Sc_c)^{0,250} \quad \text{при } Gr_c Sc_c < 10^8, \quad (6.396)$$

$$Sh' = 2 + 0,0254 (Gr_c Sc_c)^{0,250} Sc_c^{0,244} \quad \text{при } Gr_c Sc_c > 10^8, \quad (6.397)$$

$$Re = \frac{U_0 d_k \rho_c}{\mu_c}, \quad (6.398)$$

$$Sc_c = \frac{\mu_c}{\rho_c D_c}, \quad (6.399)$$

$$Gr_c = \frac{g d_k \Delta \rho}{\rho_c (\mu_c / \mu_c)^2} \quad (6.400)$$

В уравнениях (6.395)–(6.400) Sh — число Шервуда; Sc — число Шмидта; Gr — число Грасгофа; ρ_c — плотность сплошной фазы; $\Delta \rho = \rho_c - \rho_d$; D_c — коэффициент диффузии в сплошной фазе.

Для расчета коэффициента массоотдачи в сплошной фазе в случае обтекания капель с внутренней циркуляцией может быть использована модель Хигби, которая в простейшем варианте, когда время контакта фаз принимается равным времени подъема капли на расстояние, равное ее диаметру, дает следующее выражение для расчета коэффициента массоотдачи:

$$Sh_c = \frac{d_k \beta_c}{D_c} = 1,13 Re_c^{0,5} = 1,13 \left(\frac{U_0 d_k}{D_c} \right)^{0,5} \quad (6.401)$$

Модель Хигби применима в том случае, когда время контакта достаточно мало, а градиент концентрации вблизи капли велик. В противном случае необходимо учитывать конвективную диффузию вблизи поверхности капли.

Для капель с внутренней циркуляцией можно использовать также эмпирическую корреляцию Элцинга и Банчеро:

$$Sh_c = 5,52 \left(\frac{\mu_c + \mu_d}{2\mu_c + 3\mu_d} \right)^{3,47} \left(\frac{d_k \sigma \rho_c}{\mu_c^2} \right)^{0,056} Re_c^{0,5}, \quad (6.402)$$

где σ — поверхностное натяжение на границе раздела фаз.

Выражение (6.402) можно использовать при $3600 < Re_c < 22\,500$. По-

казано, что для осциллирующих капель большого диаметра значение Sh_c увеличивается примерно на 45 %.

Таким образом, достаточно обоснованный расчет коэффициентов массопередачи в системе капля — сплошная среда возможен лишь для неосциллирующих капель, которые ведут себя подобно твердым сферам, либо для неосциллирующих капель с полной внутренней циркуляцией. Осциллиция каплей и межфазовая турбулентность значительно увеличивают коэффициенты массопередачи, причем степень увеличения последних трудно поддается учету.

После расчета коэффициентов массоотдачи по приведенным выражениям на основе принципа аддитивности фазовых сопротивлений можно определить коэффициент массопередачи.

Необходимые для расчета по формулам (6.390)–(6.397) значения диаметра капель d_k и скорости движения капель должны быть определены либо экспериментально, либо рассчитаны приближенно по эмпирическим выражениям.

Расчет среднего объемно-поверхностного диаметра капель в пульсационных насадочных колоннах с насадкой в виде колец Рашига можно проводить по формуле

$$d_k = 7,25 \cdot 10^{-4} \left(\frac{\sigma}{\Delta \rho g} \right)^{0,5} \left(\frac{I \mu_c}{\sigma} \right)^{-1,4}, \quad (6.403)$$

где I — интенсивность пульсаций.

Аналогичная формула для колонн с насадкой КРИМЗ имеет вид

$$d_k = 0,135 \epsilon \left(\frac{\sigma}{\rho_c} \right)^{0,6} I^{-1,0}, \quad (6.404)$$

где ϵ — доля свободного сечения насадки.

При отсутствии экспериментальных данных по скорости осаждения (всплывания) капель дисперсной фазы эта характеристика может быть рассчитана по соотношению Кили и Трейбала, которое в размерном виде в системе СГС записывается так:

$$U_0 = \frac{0,481 \Delta \rho^{0,58} d_k^{0,7}}{\rho_c^{0,45} \mu_c^{0,11}} \quad \text{при } d_k < d_k^*, \quad (6.405)$$

$$U_0 = \frac{6,25 \cdot 10^{-3} \Delta \rho^{0,28} \mu_c^{0,1} \sigma^{0,18}}{\rho_c^{0,55}} \quad \text{при } d_k > d_k^*, \quad (6.406)$$

где d_k^* — критический размер капель, выше которого скорость капли перестает зависеть от ее диаметра:

$$d_k^* = 7,25 \left(\frac{\sigma}{g \Delta \rho \rho^{0,15}} \right)^{0,5}, \quad (6.407)$$

где

$$\rho = \frac{\rho_c^2 \sigma^3}{g \Delta \rho \mu_c^4}. \quad (6.408)$$

Модели структуры потоков в колонных экстракторах. Для оценки различной степени неравномерности времени пребывания элементов потока в рабочей зоне аппарата используются модели структуры потоков.

Для представления реальной структуры потоков в аппарате имеется целый ряд альтернативных моделей. Это ячеечные, диффузионные, комбинированные модели. Каждая из них обладает своими преимуществами и недостатками. Так, ячеечная модель относительно проста при использовании. В то же время диффузионная модель с коэффициентом продольного перемешивания дает более точные результаты. Выбор той или иной модели — задача весьма трудоемкая. В основе такого выбора должны лежать следующие оценки: 1) адекватность модели описываемому объекту; 2) простота использования; 3) затраты на поиск параметров модели.

Рассмотрим процесс экстракции в колонных аппаратах. На основании многих исследований можно заключить, что наиболее приемлемой здесь оказывается ячеечная модель с обратными потоками. Отметим, что это совсем не исключает использование диффузионной модели или комбинированных моделей.

Ячеечная модель с обратными потоками. Дадим математическое описание процесса экстракции, основанное на указанной модели.

Структура потоков в модели приведена на рис. 6.20.

Для этой модели приняты следующие допущения: 1) растворитель и фаза рафината взаимно нерастворимы; 2) величина объемного коэффициента массопередачи постоянна по высоте колонны; 3) объемные скорости растворителя и рафинатной фазы постоянны по высоте колонны; 4) объемы ячеек идеального смешения одинаковы по высоте колонны; 5) обратное перемешивание в пределах каждой фазы выражается постоянными коэффициентами обратного перемешивания; 6) концентрация каждой фазы постоянна в пределах каждой ячейки идеального смешения; 7) начало отсчета высоты ведется со стороны входа фазы рафината.

В результате расчета определяют:

а) при проверочном расчете экстрактора — профили концентраций по колонне и составы продуктов разделения;

б) при проектном расчете экстрактора — диаметр и высоту экстрактора заданного типа, составы продуктов разделения (при заданном содержании целевого компонента в одном из продуктов).

Найдем потоки экстрагируемого вещества через соответствующие сечения аппарата с учетом массопередачи. Схема потоков приведена на рис. 6.21.

По фазе L :

$$J_L^{-1} = L(1 + f_L)C_{f-1}^L; \quad I_L^{-1} = Lf_L C_{f-1}^L, \quad (6.409)$$

$$J_L^I = L(1 + f_L)C_f^L; \quad I_L^I = Lf_L C_f^L. \quad (6.410)$$

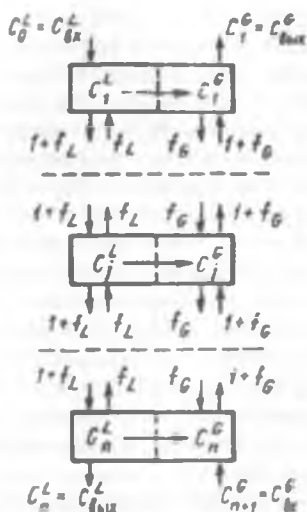


Рис. 6.20. Модель структуры потоков

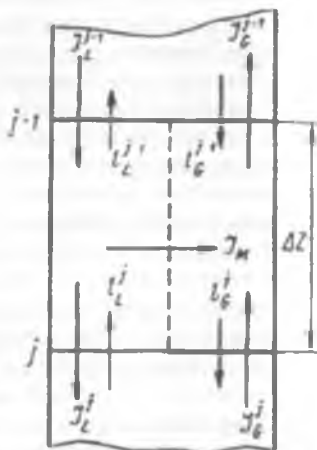


Рис. 6.21. Потоки в системе с массообменом

По фазе G :

$$J_G^{j-1} = G(1 + f_G)C_{j-1}^G; \quad l_G^{j-1} = Gf_G C_{j-2}^G, \quad (6.411)$$

$$J_G^j = G(1 + f_G)C_j^G; \quad l_G^j = Gf_G C_{j-1}^G. \quad (6.412)$$

Поток межфазного переноса:

$$J_m = K_V^G \Delta z F_{св} [\Psi(C_j^L) - C_j^G]. \quad (6.413)$$

Тогда общий материальный баланс по фазам примет следующий вид:
для фазы L :

$$J_L^{j-1} - l_L^{j-1} + l_L^j - J_L^j - J_m = 0; \quad (6.414)$$

для фазы G :

$$J_G^j - l_G^j + l_G^{j-1} - J_G^{j-1} + J_m = 0. \quad (6.415)$$

Отсюда, раскрывая выражения для потоков, записываем уравнение покомпонентного баланса:

$$L(1 + f_L)C_{j-1}^L - Lf_L C_{j-1}^L + Lf_L C_{j+1}^L - L(1 + f_L)C_j^L - K_V^G \Delta z F_{св} [\Psi(C_j^L) - C_j^G] = 0, \quad (6.416)$$

$$G(1 + f_G)C_{j-1}^G - Gf_G C_{j-1}^G + Gf_G C_{j-2}^G - G(1 + f_G)C_j^G + K_V^G \Delta z F_{св} [\Psi(C_j^L) - C_j^G] = 0. \quad (6.417)$$

Здесь: G — расход фазы G , $\text{м}^3/\text{ч}$; L — расход фазы L , $\text{м}^3/\text{ч}$; $f_L = L_{\text{обр}}/L$ — доля обратного потока по фазе L ; $f_G = G_{\text{обр}}/G$ — доля обратного потока по фазе G ; C_j^L — концентрация в фазе L в j -м сечении; C_j^G — концентрация в фазе G в j -м сечении; K_V^G — объемный коэффициент массопередачи, ч^{-1} ; $\Delta z = H/n$ — высота участка идеального смешения m ; n — число ступеней идеального смешения; $F_{\text{св}}$ — свободное сечение в насадке, м^2 ; $\Psi(C^L)$ — равновесная зависимость.

Введем также обозначения:

$$\frac{G}{K_V^G F_{\text{св}} \Delta z} = \text{ВЕП}_G \quad \text{— высота единицы переноса в фазе } G;$$

$$\frac{\text{ВЕП}_G}{n \text{ВЕП}_G} = \frac{H}{n \text{ВЕП}_G} = \lambda \quad \text{— число единиц переноса на ступень смешения в фазе } G;$$

$$\frac{\Delta z K_V^G F_{\text{св}}}{L} = \kappa \quad \text{— число единиц переноса на ступень смешения в фазе } L.$$

Если принять во внимание, что отношение потоков фазы рафината и фазы экстракта может быть обозначено $\varphi = G/L$, то соотношение между коэффициентами λ и κ примет вид

$$\kappa = \lambda \varphi. \quad (6.418)$$

Рассмотрев аналогично потоки на концах аппарата, получим систему уравнений материального баланса для n ступеней, которая представляет собой ячеечную модель с обратными потоками, описывающую процесс массопередачи в колонном экстракторе при нелинейной равновесной зависимости:

для первой ячейки:

$$\begin{aligned} -C_0^L + (1 + f_L) C_1^L + \lambda \varphi \Psi(C_1^L) - \lambda \varphi C_1^G - C_2^L f_L = \\ = P_1(C_1^L, C_2^L, C_1^G) = 0, \end{aligned} \quad (6.419)$$

$$\begin{aligned} -\lambda \varphi \Psi(C_1^L) + (1 + f_G + \lambda) C_1^G - (1 + f_G) C_2^G = \\ = P_2(C_1^L, C_1^G, C_2^G) = 0, \end{aligned} \quad (6.420)$$

для j -й ячейки:

$$\begin{aligned} -(1 + f_L) C_{j-1}^L + \lambda \varphi \Psi(C_j^L) + (1 + 2f_L) C_j^L - \lambda \varphi C_j^G - f_L C_{j+1}^L = \\ = P_{2j-1}(C_{j-1}^L, C_j^L, C_j^G, C_{j+1}^L) = 0, \end{aligned} \quad (6.421)$$

$$\begin{aligned} -f_G C_{j-1}^G - \lambda \varphi \Psi(C_j^L) + (1 + 2f_G + \lambda) C_j^G - (1 + f_G) C_{j+1}^G = \\ = P_{2j}(C_{j-1}^G, C_j^L, C_j^G, C_{j+1}^G) = 0, \end{aligned} \quad (6.422)$$

для n -й ячейки:

$$-(1+f_L)C_{n+1}^L + (1+f_L)C_n^L + \lambda\psi(C_n^L) - \lambda\varphi C_n^G = \\ = P_{2n-1}(C_{n+1}^L, C_n^L, C_n^G) = 0, \quad (6.423)$$

$$-f_G C_{n-1}^G - \lambda\psi(C_n^L) + (1+2f_G + \lambda)C_n^G - C_{n+1}^G = \\ = P_{2n}(C_{n-1}^G, C_n^L, C_n^G, C_{n+1}^G) = 0, \quad (6.424)$$

где $P(C)$ – вектор-столбец

$$P^T(C) = (C_1^L, C_1^G, \dots, C_j^L, C_j^G, \dots, C_n^L, C_n^G),$$

который определяет профиль концентраций по высоте экстрактора в обеих фазах.

Решение уравнений (6.419) – (6.424) находим, используя метод Ньютона. Для системы уравнений произвольного порядка алгоритм метода Ньютона в обобщенном виде может быть представлен как

$$P(C_k) + P'(C_k)(C_{k+1} - C_k) = 0, \quad (6.425)$$

где $P'(C_k)$ – матрица Якоби от функций $P_1, P_2, \dots, P_{2j-1}, P_{2j}, \dots, P_{2n-1}, P_{2n}$ системы уравнений (6.419) – (6.424).

После представления системы уравнений (6.419) – (6.424) в виде блочной матрицы, элементами которой являются квадратные подматрицы и диагонализации блочной матрицы Якоби, получаем следующую матричную систему уравнений:

$$\begin{bmatrix} C_1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ A_2 & C_2 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & A_j & C_j & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & A_n & C_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_1 \\ V_2 \\ \vdots \\ V_j \\ \vdots \\ V_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E_1 \\ E_2 \\ \vdots \\ E_j \\ \vdots \\ E_n \end{bmatrix} \quad (6.426)$$

Решение этого матричного уравнения находим с помощью соотношений:

$$V_1 = (C_1)^{-1} E_1, \quad (6.427)$$

$$V_j = (C_j)^{-1} [E_j - A_j E_{j-1} (C_{j-1})^{-1}],$$

Здесь

$$C_n = B_n,$$

$$C_j = B_j - D_j (C_{j+1})^{-1} A_{j+1}; \quad (6.428)$$

$$E_n = e_n.$$

$$E_j = e_j - D_j (E_{j+1})^{-1} A_{j+1}; \quad (6.429)$$

$$V_j = \begin{bmatrix} C_j^L \\ C_j^G \end{bmatrix}; \quad (6.430)$$

$$e_j = \begin{bmatrix} -\lambda \varphi a_j \\ \lambda a_j \end{bmatrix}; \quad (6.431)$$

$$e_1 = \begin{bmatrix} C_0^L - \lambda \varphi a_1 \\ \lambda \varphi a_1 \end{bmatrix}; \quad (6.432)$$

$$a_j = \psi(C_j^L) - \psi'(C_j^L) C_j^L; \quad (6.433)$$

$$A_j = \begin{bmatrix} -(1 + \delta_j f_L) & 0 \\ 0 & -\delta_j f_L \end{bmatrix}. \quad (6.434)$$

где символ δ_j , учитывающий граничные условия, имеет вид

$$\delta_j = \begin{cases} 0 & \text{при } j = 1, \\ 1 & \text{при } 2 \leq j \leq n; \end{cases} \quad (6.435)$$

$$B_j = \begin{bmatrix} \{1 + (1 + \bar{\delta}_j) f_L + \lambda \varphi \psi'(C_j^L)\} & \{-\lambda \varphi\} \\ \{-\lambda \psi'(C_j^L)\} & \{1 + (1 + \bar{\delta}_j) + \lambda\} \end{bmatrix}. \quad (6.436)$$

причем

$$\bar{\delta}_j = \begin{cases} 0 & \text{при } j = 1, \\ 1 & \text{при } 2 \leq j \leq n-1; \end{cases} \quad (6.437)$$

$$D_j = \begin{bmatrix} \delta_j^* f_L & 0 \\ 0 & (-1 + \delta_j^* f_L) \end{bmatrix}.$$

причем

$$\delta_j^* = \begin{cases} 0 & \text{при } j = n, \\ 1 & \text{при } 1 \leq j \leq n-1. \end{cases} \quad (6.438)$$

Решение матричного уравнения (6.426) проводится по алгоритму, приведенному ниже (рис. 6.22). В качестве начального приближения используется профиль концентраций, рассчитанный для линейной равновесной зависимости с постоянным коэффициентом распределения $m = \psi'(0)$.

В приложении 9 дана программа EXTRAC расчета колонных экстракторов по ячеечной модели с обратными потоками.

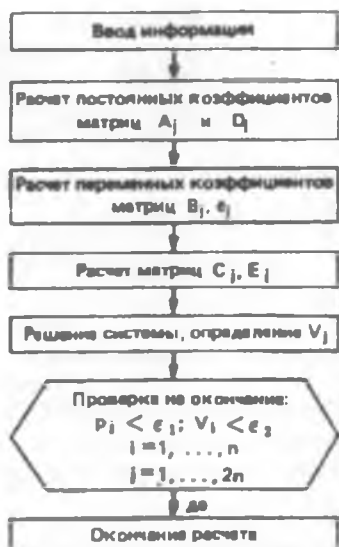


Рис. 6.22. Блок-схема алгоритма экстрактора (проверочная по постановке задачи)

Равновесную зависимость для исследуемой системы в большинстве случаев получают экспериментально.

Удерживающая способность экстрактора по дисперсной фазе определяется так:

$$h_L = \frac{\text{объем диспергированной фазы в колонне}}{\text{свободный объем колонны}} = \frac{V_L}{V_{св}}. \quad (6.439)$$

Значение объема дисперсной фазы может быть найдено по формуле

$$V_L = \bar{\tau} L, \quad (6.440)$$

где $\bar{\tau}$ — среднее время пребывания капель в колонне; L — расход диспергированной фазы.

Для нахождения свободного объема колонны используют соотношения

$$V_{св} = HF_{св}; \quad H = \bar{\tau} u_L, \quad (6.441)$$

где H — высота колонны; $F_{св}$ — свободное сечение в насадке; u_L — средняя скорость всплывания каплей относительно стенок колонны.

Отсюда

$$h_L = \frac{L}{u_L F_{св}}. \quad (6.442)$$

Для расчета экстрактора по уравнениям ячеечной модели с обратными потоками необходимо предварительно определить ее параметры. К числу параметров модели, подлежащих определению, относятся: удерживающая способность h_L ; доли обратных потоков в фазах; коэффициент массопередачи; параметры равновесной зависимости.

Величина коэффициента массопередачи определяется параметром λ , характеризующим скорость массопередачи, и находится из экспериментальных данных. Для этого снимают экспериментальный профиль концентраций компонентов по высоте экстрактора в заданном режиме работы. По известному алгоритму и вычисленным параметрам модели рассчитывают теоретический профиль концентраций. Варьируя λ , добиваются такого совпадения профилей, при котором сумма квадратов отклонений экспериментальных значений от теоретических была бы минимальна.

При фиксированном энергетическом уровне воздействия на поток (интенсивность пульсаций, перемешивания) и заданных нагрузках по фазам L и G векторы средних скоростей фаз, движущихся противотоком, связаны между собой соотношением

$$U_L^0 (1 - h_L)^m = \frac{L}{h_L F_{св}} + \frac{G}{(1 - h_L) F_{св}}, \quad (6.443)$$

где U_L^0 — характеристическая скорость движения одиночной капли; $(1 - h_L)^m$ — множитель, учитывающий влияние стесненности на скорость движения капель в сплошной фазе; m — коэффициент, отражающий влияние конструктивных особенностей тарелок, насадок и т.д. на стесненность движения капель (для пульсационных насадочных колонн $m \approx 1$).

Равенство (6.443) может быть преобразовано к виду

$$k = \frac{L}{U_L^0 F_{св}} = \frac{(1 - h_L)^m h_L}{[1 + \frac{\varphi h_L}{1 - h_L}]}. \quad (6.444)$$

В этом уравнении соотношение $\varphi = G/L$ представляет собой соотношение нагрузок по фазам.

Удерживающую способность при известном значении отношения нагрузок φ определяют по номограмме, либо из уравнения (6.444). Для расчета

величины $k = \frac{L}{U_L^0 F_{св}}$ экспериментально определяют значение характеристической скорости $U_L^0 = H/\bar{\tau}_d^0$ (где H — высота аппарата; $\bar{\tau}_d^0$ — среднее время пребывания группы капель в колонне при $h_L \rightarrow 0$).

Характеристическая скорость обратно пропорциональна среднему времени пребывания при отсутствии нагрузки по сплошной фазе, т.е. в этом случае $U_G = 0$.

При фиксированной интенсивности пульсаций наносят небольшое возмущение по дисперсной фазе. Измеряя уровень раздела фаз в верхнем отстойнике, получают F -кривую, из которой затем определяют $\bar{\tau}_d^0$. Меняя режимы пульсаций, аналогичным образом определяют $\bar{\tau}_d^0$ для других режимов. По полученным данным устанавливают зависимость $\bar{\tau}_d^0$ от режимов пульсации.

Определив U_L^0 , рассчитывают $k = L/(U_L^0 F_{св})$ и определяют h_L для заданного φ .

Зная h_L , определяют истинные скорости дисперсной и сплошной фаз по формулам

$$u_d = \frac{L}{F_{св} h_L}; \quad u_c = \frac{G}{F_{св} (1 - h_L)}. \quad (6.445)$$

Далее производят расчет долей обратных потоков в фазах. Полученные значения u_d и u_c подставляют в выражение для числа Пекле:

$$Pe_L = \frac{u_n H}{D_L}; \quad Pe_G = \frac{u_c H}{D_G}, \quad (6.446)$$

где D_L, D_G — коэффициенты продольного перемешивания в фазах L и G соответственно.

Значения коэффициентов D_L, D_G получают экспериментально. Величины долей обратных потоков по фазам f_L и f_G рассчитывают по формулам

$$f_L = \frac{N}{Pe_L} - \frac{1}{2}; \quad f_G = \frac{N}{Pe_G} - \frac{1}{2}, \quad (6.447)$$

Обоснуем соотношения (6.447). Для этого представим производные $\partial^2 C / \partial z^2$ и $\partial C / \partial z$ в конечно-разностном виде:

$$\frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \approx \frac{C_{j+1} - 2C_j + C_{j-1}}{(\bar{l})^2}, \quad (6.448)$$

$$\frac{\partial C}{\partial z} \approx \frac{C_{j+1} - C_{j-1}}{2\bar{l}}, \quad (6.449)$$

где $\bar{l}$ — расстояние, характеризующее средний масштаб турбулентности (в секционированных аппаратах этот масштаб может достигать размера расстояний между тарелками и для ячеечной модели соответствует длине зоны идеального смешения).

Подставляя (6.448), (6.449) в уравнение диффузионной модели (3.87), получаем

$$\frac{\bar{l}}{\bar{u}} \frac{dC_j}{dt} = - \frac{C_{j+1} - C_{j-1}}{2} + \frac{D_L}{\bar{u}\bar{l}} (C_{j+1} - 2C_j + C_{j-1}), \quad (6.450)$$

где $\bar{u}$ — средняя скорость движения.

Поскольку $\bar{l} = H/N$ (H — высота аппарата, N — число ячеек), имеем

$$\frac{\bar{l}}{\bar{u}} = \frac{H}{N\bar{u}} = \frac{\bar{\tau}}{N} \quad (6.451)$$

и соответственно

$$\frac{D_L}{\bar{u}\bar{l}} = \frac{N}{Pe}. \quad (6.452)$$

Преобразуем уравнение (6.450) к виду

$$\left(\frac{N}{Pe} + \frac{1}{2}\right)(C_{j-1} - C_j) - \left(\frac{N}{Pe} - \frac{1}{2}\right)(C_j - C_{j+1}) = \frac{\bar{\tau}}{N} \frac{dC_j}{dt}. \quad (6.453)$$

Сравнивая последнее уравнение с уравнением сохранения массы для ячеечной модели с обратными потоками, имеем вид

$$\gamma(C_{j-1} - C_j) - f(C_j - C_{j+1}) = \frac{\bar{\tau}}{N} \frac{dC_j}{dt}, \quad (6.454)$$

и сопоставляя коэффициенты в соответствующих слагаемых уравнений (6.453), (6.454), приходим к равенству

$$f = \frac{N}{Pe} - \frac{1}{2}, \quad (6.455)$$

Соотношение (6.455) используется для расчета величины обратного потока по значению Pe , которое, в свою очередь, определяется с помощью методов оценки параметра диффузионной модели. Величина обратного потока однозначно определяется через значение Pe только тогда, когда зафиксировано число ячеек. В ряде случаев, как, например, для насадочных аппаратов, число ячеек заранее не определено и требуется дополнительная информация для одновременного нахождения N и f .

Рассмотрим оценку продольного перемешивания в дисперсной и сплошной фазах экстрактора. Такая оценка проводится в большинстве случаев на основе экспериментальных данных.

Продольное перемешивание в дисперсной фазе можно оценить при нанесении ступенчатого возмущения $\Delta L_{вх}$ по расходу дисперсной фазы в колонну. При этом в колонне происходит размывание движущегося фронта возмущения так, что на выходе из рабочей части экстрактора наблюдается распределение фронта возмущения $\Delta L_{вых}$ по времени пребывания (рис. 6.23).

Скорость перемещения фронта зависит от скорости движения капель дисперсной фазы внутри сплошной. Следовательно, смещение по оси времени характеристики $\Delta L_{вых}$ относительно момента возмущения $\Delta L_{вх}$ является мерой времени пребывания дисперсной фазы в аппарате.

Непосредственное измерение $\Delta L_{вых}$ внутри аппарата сопряжено со значительными трудностями. Поэтому целесообразнее воспользоваться измерением косвенных параметров: уровня раздела фаз или перепада давления в колонне, которые однозначно связаны с $\Delta L_{вх}$ и $\Delta L_{вых}$.

Измерение уровня раздела фаз $h_{рф}$ (рис. 6.24) не представляет значительных технических трудностей, однако обычно в промышленных условиях этот параметр является управляемым и, кроме того, он весьма чувствителен к небалансу расходов подачи и отвода сплошной фазы. Поэтому

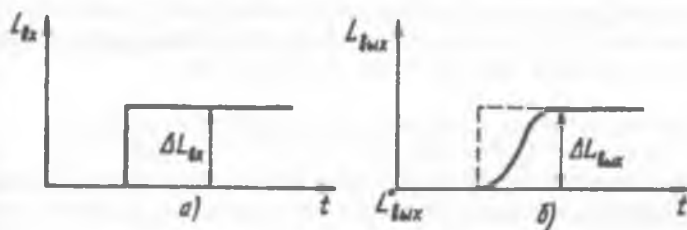


Рис. 6.23. Функция отклика при ступенчатом возмущении по расходу дисперсной фазы: а — изменение входного сигнала; б — изменение выходного сигнала ($L_{вых}^0$ — значение выходного сигнала до нанесения возмущения)

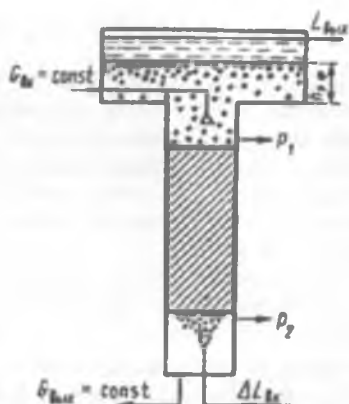


Рис. 6.24. Схема отбора импульсов при измерении перепада давлений

измерение характеристик по дисперсной фазе при противотоке сплошной может сопровождаться значительными погрешностями.

Меньшей погрешностью по отношению к нагрузкам по сплошной фазе обладает метод, основанный на измерении перепада давлений $\delta P = P_2 - P_1$ (рис. 6.24).

Сущность метода заключается в следующем. Положим $\Delta L_{\text{вых}} = \Delta L_{\text{вх}} F(t)$, где $F(t)$ — кривая, характеризующая рассеяние по времени пребывания в дисперсной фазе. Величина

$$\Delta V_d(t) = \Delta L_{\text{вх}} \int_0^t [1 - F(t)] dt \quad (6.456)$$

характеризует приращение объема дисперсной фазы в колонне за время переходного режима после нанесения возмущения. Тогда отношение

$$\frac{\Delta \bar{V}_d}{V_{\text{св}}} = \Delta h(t) \quad (6.457)$$

соответствует приращению по времени удерживающей способности. С учетом того, что импульсные трубки дифференциального манометра обычно заполнены сплошной фазой, перепад давлений выразим через среднюю плотность смеси в рабочей части колонны. Тогда получим

$$\begin{aligned} \delta P = P_2 - P_1 &= \gamma_{\text{ср}} H - \gamma_{\text{с}} H = \left(\frac{\gamma_{\text{с}} \bar{V}_{\text{с}} + \gamma_{\text{д}} \bar{V}_{\text{д}}}{V_{\text{св}}} - \gamma_{\text{с}} \right) H = \\ &= [\gamma_{\text{с}} (1 - h) + \gamma_{\text{д}} h - \gamma_{\text{с}}] H = -(\gamma_{\text{с}} - \gamma_{\text{д}}) h H = -\Delta \rho g h H, \end{aligned} \quad (6.458)$$

где $\Delta \rho$ — разность плотностей фаз; g — ускорение свободного падения; H — высота рабочей части аппарата.

Динамика приращения перепада давлений в колонне при ступенчатом возмущении по расходу дисперсной фазы подчиняется зависимости

$$\Delta [F(t)] = - \frac{\varepsilon \Delta \rho \Delta L_{\text{вх}}}{F_{\text{св}}} \int_0^t [1 - F(t)] dt. \quad (6.459)$$

В приведенной формуле значение измеряемой величины — перепада давления — связано интегральным соотношением с искомой функцией отклика $F(t)$. На основании отмеченного свойства данный метод получил название *интегрального метода измерения*.

Рассмотренный метод не предполагает введения трассера в аппарат. Простота реализации позволяет рекомендовать его для использования на промышленных аппаратах в условиях действующих производств. Недостаток метода заключается лишь в том, что в аппаратах, интенсифицированных подводом внешней энергии (пульсациями, вибрацией, работой перемешивающих устройств), вместе с полезным низкочастотным сигналом регистрируются высокочастотные помехи. Поэтому возникает необходимость включения высокочастотных фильтров в схему измерительных устройств.

Оценка продольного перемешивания в сплошной фазе экстрактора осуществляется индикаторными методами. Чаще других используется импульсный метод.

При оценке уровня продольного перемешивания по С-кривой на выходе из экстрактора фиксируется совокупный эффект, обусловленный как турбулентным перемешиванием, так и всеми видами поперечной неравномерности. Между тем упорядоченность гидродинамического режима обусловлена подавляющим влиянием турбулентного фактора. Для того чтобы оценить степень вклада турбулентной составляющей в продольное перемешивание, желательно располагать методом, позволяющим независимо определять значение этой составляющей. Таким методом является метод установившегося состояния, рассмотренный в § 3.1. Так как в данном методе индикатор вводится в поток на выходе из аппарата, то распределение концентрации индикатора по длине внутри аппарата характеризует турбулентную составляющую продольного перемешивания D_T .

Распределение концентрации по длине аппарата $C(z)$ в методе установившегося состояния имеет вид

$$C(z) = C(l) \exp \left[- \frac{u}{D_T} (l - z) \right], \quad (6.460)$$

где l — длина аппарата; u — средняя скорость движения потока по аппарату.

Построение зависимости (6.460) в полулогарифмических координатах позволяет по тангенсу угла наклона определить отношение u/D_T (рис. 6.25).

Скорость сплошной фазы при противотоке дисперсной фазы может быть определена с учетом найденного значения удерживающей способности по уравнению (6.445).

Сопоставление коэффициентов продольного перемешивания, опре-

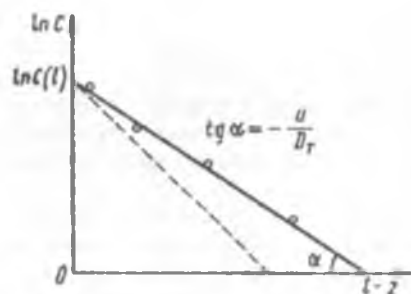


Рис. 6.25. К определению коэффициента турбулентного перемешивания D_T по профилю концентрации в полулгарифмических координатах

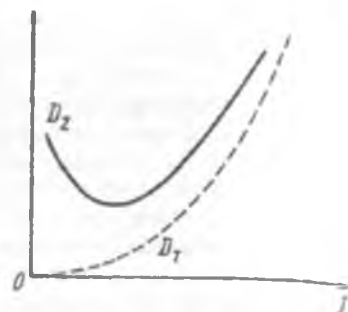


Рис. 6.26. Соотношение общего $D_Σ$ и турбулентного D_T коэффициентов продольного перемешивания в зависимости от интенсивности пульсаций

деленных импульсным методом и методом установившегося состояния, отражает уровень поперечной неравномерности в аппарате. На рис. 6.26 показано соотношение этих коэффициентов для пульсационной насадочной колонны в зависимости от интенсивности пульсаций $J = A\nu$. По мере увеличения интенсивности уменьшается влияние поперечной неравномерности:

$$D_{п.н} = D_Σ - D_T. \quad (6.461)$$

где $D_{п.н}$ — коэффициент продольного перемешивания вследствие поперечной неравномерности.

При значительных интенсивностях продольное перемешивание целиком определяется турбулентным фактором. В связи с этим при оптимальном проектировании необходимо устранить поперечную неравномерность при возможно более низких значениях J .

Диффузионная модель. Наряду с ячеечной моделью потоков фаз в экстракционной колонне широко используется диффузионная модель, включающая коэффициент продольного перемешивания D_L . На рис. 6.27 изображена схема потоков фаз в колонне для диффузионной модели.

Для выделенного элемента dz условие равенства прихода и расхода массы по извлекаемому компоненту дает следующее уравнение материального баланса:

$$LC_F^L + GC^G = GC_E^G + LC^L + D_G \frac{dC^G}{dz} - D_L \frac{dC^L}{dz}, \quad (6.462)$$

где G — фиктивная скорость обогащенной фазы, м/ч; C^G — концентрация в обогащенной фазе, кг/м³; D_G — коэффициент продольного перемешивания, м²/ч.

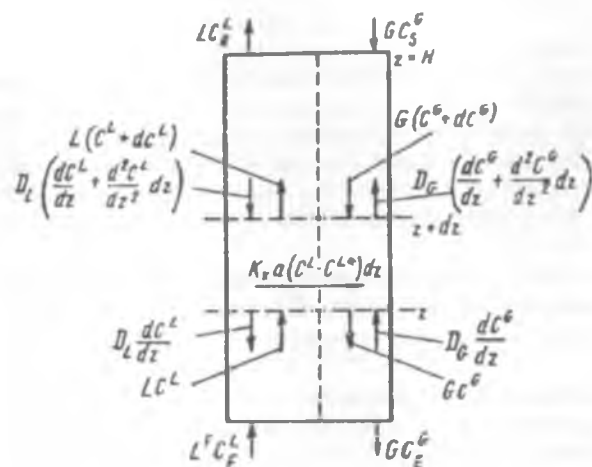


Рис. 6.27. К выводу уравнения материального баланса процесса экстракции для диффузионной модели

Записав уравнение диффузионной модели для сечения, получаем

$$D_L \frac{d^2 C^L}{dz^2} - w_L \frac{dC^L}{dz} = K_{CL} a (C^L - C^{L*}), \quad (6.463)$$

где D_L — коэффициент продольного перемешивания в фазе L ; C^L — концентрация, кг/м³; w_L — фиктивная скорость фазы L , м/ч; z — координата, м; $K_{CL} a$ — объемный коэффициент массопередачи, ч⁻¹.

Уравнения (6.462), (6.463) приводятся к виду

$$\frac{dx}{dz} = -\frac{K_{CL} a}{L} (C^L - C^{L*}), \quad (6.464)$$

$$Px_p = Lx - Gy, \quad (6.465)$$

где

$$x = C^L - \frac{D_L}{L} \frac{dC^L}{dz}, \quad (6.466)$$

$$y = C^G + \frac{D_G}{G} \frac{dC^G}{dz}, \quad (6.467)$$

$$Px_p = LC_F^L - GC_E^G. \quad (6.468)$$

Для решения системы уравнений (6.464) — (6.465) необходимо задать граничные условия:

$$x_0 = C_F^L \text{ при } z = 0, \quad (6.469)$$

$$y_n = C_S^G \quad \text{при } z = H. \quad (6.470)$$

Алгоритм решения системы уравнений математического описания состоит в следующем:

1. Задают значения параметров D_L , D_G , K_{Ca} , величины потоков L , G , высоту колонны H , а также начальное приближение состава C_E^G .

2. Производят интегрирование системы уравнений (6.464) – (6.465) методом Рунге–Кутты (Рунге–Кутта–Мерсона) и определяют состав выходящего потока C_R^L .

3. По общему материальному балансу экстракционной колонны корректируют заданный состав потока C_E^G :

$$(C_E^G)^{S+1} = (LC_F^L + GC_S^G - LC_R^L) / G. \quad (6.471)$$

4. Если выполняется условие

$$|(C_E^G)^{S+1} - (C_E^G)^S| < \epsilon, \quad (6.472)$$

то расчет заканчивают.

В противном случае расчет продолжают с п. 2 при новом значении $(C_E^G)^{S+1}$.

§ 6.8. Сушка твердых сыпучих материалов

Процесс удаления влаги из твердых и пастообразных материалов путем ее испарения широко используется в химической технологии. При этом высушиваемым материалам удается придать необходимые свойства (например, уменьшить слеживаемость удобрений или улучшить растворимость красителей), удешевить их транспортировку, а также уменьшить коррозию аппаратуры и трубопроводов при хранении и последующей обработке этих материалов.

В химических производствах, как правило, применяется искусственная сушка материалов в специальных сушильных установках, так как естественная сушка на открытом воздухе — процесс слишком длительный.

По своей физической сущности сушка является сложным тепло- и массообменным процессом, скорость которого определяется скоростью диффузии влаги из глубины высушиваемого материала в окружающую среду. Удаление влаги при сушке сводится к перемещению теплоты и вещества (влаги) внутри материала и их переносу с поверхности материала в окружающую среду. По способу подвода теплоты к высушиваемому материалу различаются следующие виды сушки:

- 1) *конвективная* — путем непосредственного соприкосновения высушиваемого материала с сушильным агентом;
- 2) *контактная* — путем передачи теплоты от теплоносителя к материалу через разделяющую их стенку;
- 3) *радиационная* — путем передачи теплоты инфракрасными лучами;

- 4) *диэлектрическая* — путем нагревания;
 5) *сублимационная* — сушка в замороженном состоянии при глубоком вакууме.

Равновесие при сушке. Если материал находится в контакте с влажным воздухом, то принципиально возможны два процесса: а) сушка (десорбция влаги из материала) при парциальном давлении пара над поверхностью материала P_m , превышающим его парциальное давление в воздухе или газе P_n , т.е. при $P_m > P_n$; б) увлажнение (сорбция влаги материалом) при $P_m < P_n$.

В процессе сушки величина P_m уменьшается и приближается к пределу $P_m = P_n$. При этом наступает состояние динамического равновесия, которому соответствует предельная влажность материала, называемая *равновесной влажностью* ω_p .

Равновесная влажность зависит от парциального давления водяного пара над материалом P_n или пропорциональной ему величины относительной влажности воздуха $\varphi = P_n/P_n$ (где P_n — давление насыщенного водяного пара при данной температуре).

Зависимость $\omega_p = f(\varphi)$ устанавливается при постоянной температуре и является изотермой.

Материальный и тепловой балансы сушки. Для составления материального баланса введем обозначения: G_1 — количество влажного материала, поступающего на сушку, кг/ч; G_2 — количество высушенного материала, кг/ч; u_0 и u_k — начальная и конечная влажность материала, %; W — количество удаляемой при сушке влаги, кг/ч.

Тогда условие материального баланса запишется следующим образом:

для всего материала:

$$G_1 = G_2 + W, \quad (6.473)$$

для абсолютно сухого вещества:

$$G_1 \frac{100 - u_0}{100} = G_2 \frac{100 - u_k}{100}. \quad (6.474)$$

Обычно целью составления материального баланса является определение количества влаги W , удаляемой при сушке:

$$W = G_1 - G_2. \quad (6.475)$$

Используя соотношение (6.474), уравнение для расчета количества влаги (6.475) можно записать в виде

$$W = G_2 \frac{u_0 - u_k}{100 - u_0}. \quad (6.476)$$

Если количество влаги W известно, то из уравнения (6.476) можно определить количество высушенного материала G_2 .

Остановимся на тепловом балансе сушки. Пусть на сушку поступает G_1 кг/ч исходного материала, имеющего температуру t_1 °C. В сушилке

из материала испаряется W кг/ч влаги и из сушки удаляется G_2 кг/ч высушенного материала при температуре t_2 °С, с теплоемкостью c_m Дж/(кг·град), причем теплоемкость влаги составляет c_w Дж/(кг·град).

В сушилку подается влажный воздух, содержащий L кг/ч абсолютно сухого воздуха. Перед калорифером воздух имеет энтальпию I_0 Дж/кг сухого воздуха. После нагрева, т.е. на входе в сушилку, энтальпия воздуха повышается до I_1 Дж/кг сухого воздуха. В процессе сушки в результате передачи теплоты материалу, поглощения испаряющейся из материала влаги и потерь теплоты в окружающую среду, энтальпия воздуха изменяется и на выходе из сушилки энтальпия отработанного воздуха равна I_2 Дж/кг сухого воздуха. Теплоту, подводимую в калорифер, обозначим через Q_k . Тогда с учетом потерь теплоты сушилкой в окружающую среду Q_n имеем

$$LI_0 + G_2 c_m t_1 + W c_w t_1 + Q_k = LI_2 + G_2 c_m t_2 + Q_n. \quad (6.477)$$

Из этого уравнения можно определить общий расход теплоты на сушку:

$$Q_k = L(I_2 - I_0) + G_2 c_m (t_2 - t_1) - W c_w t_1 + Q_n. \quad (6.478)$$

Разделив обе части последнего уравнения на W , получим выражение для общего расхода тепла на 1 кг испаренной влаги:

$$q_k = l(I_2 - I_0) + q_m - c_w t_1 + q_n, \quad (6.479)$$

где

$$l = \frac{L}{W}; \quad q_m = \frac{G_2 c_m (t_2 - t_1)}{W}; \quad q_n = \frac{Q_n}{W}. \quad (6.480)$$

Кинетика процесса сушки. Кинетика процесса сушки химических продуктов характеризуется скоростью удаления влаги, т.е. изменением влаго-содержания продукта во времени. Знание кинетических зависимостей и их параметров необходимо при проектировании аппаратов и управлении процессом сушки.

Обычно при оценке кинетических параметров используются кривые сушки, получаемые экспериментально и представляющие собой зависимость влаго-содержания и от времени.

Кривые сушки кристаллогидратов можно разделить на несколько периодов, каждый из которых характеризуется определенным механизмом массопередачи. Так, типичная кривая сушки кристаллогидратов, изображенная на рис. 6.28, может быть разбита на три участка: участок с постоянной скоростью сушки (I) и на два участка с уменьшающейся скоростью сушки (II и III), которым соответствуют различные механизмы удаления влаги.

В настоящее время существует несколько подходов к описанию механизма переноса влаги из материала в воздух: диффузионный, капиллярный и обобщенный, использующие или не использующие представления о движении внутри частицы фронте испарения.

Период постоянной скорости сушки. При рассмотрении этого периода обычно принимают, что на поверхности частицы достигается состояние фазового равновесия, т.е. частица окружена пленкой влаги и воздух над ней находится в состоянии насыщения и имеет температуру мокрого термометра. Тогда скорость процесса сушки определяется состоянием окружающей среды и условиями сушки, а полный поток влаги записывается через объемный коэффициент массоотдачи:

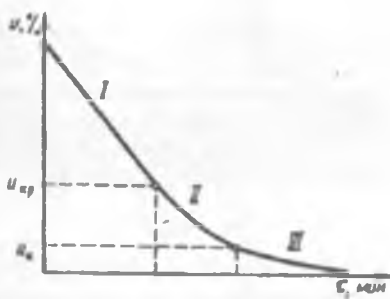


Рис. 6.28. Типичная кривая сушки кристаллогидратов

$$-\frac{d\mu}{d\tau} = j = \beta(x_r - x) = \beta(x^* - x), \quad (6.481)$$

где x_r — влагосодержание воздуха (кг/кг) на границе частицы, которое считается равновесным, т.е. $x_r = x^*$; x — влажность (воздуха) в объеме сплошной фазы. Обе величины находятся по психрометрическим данным.

Из экспериментально полученных значений потока влаги j (% л.в.ч.⁻¹) при различных температурах можно найти величину β , используя соотношение

$$\beta = \frac{j}{x^* - x}. \quad (6.482)$$

Парциальные давления насыщенных паров P при разных температурах t находят из таблиц, а мольные доли m — из соотношений

$$m^* = \frac{P_i^*}{P}; \quad m = \frac{P_i^* \varphi}{P}, \quad (6.483)$$

где P — атмосферное давление, мм рт.ст.; φ — относительная влажность воздуха, определяемая по температуре сухого и мокрого термометров ($t_{\text{сух.}}$, $t_{\text{мокр.}}$). Тогда влагосодержание x^* и x находят по формулам

$$x^* = \frac{M_{\text{в}}}{M_{\text{возд}}} \frac{m^*}{1 - m^*}, \quad (6.484)$$

$$x = \frac{M_{\text{в}}}{M_{\text{возд}}} \frac{m}{1 - m}. \quad (6.485)$$

Так, если температурный режим в аппарате $t = 70^\circ\text{C}$, а температура окружающего воздуха равна 17°C при влажности 70%, то

$$x^* = \frac{18}{29} \frac{P_{70}^*/760}{1 - P_{70}^*/760} = \frac{18}{29} \frac{233,7/760}{1 - 233,7/760} = 0,274,$$

$$x = \frac{18}{29} \frac{P_{17}^* \varphi / 760}{1 - P_{17}^* \varphi / 760} = \frac{18}{29} \frac{14,53 \cdot 0,7 / 760}{1 - 14,53 \cdot 0,7 / 760} = 0,00844.$$

Обработкой эксперимента, выполненного при различных температурах, можно получить зависимость $\beta = f(t)$.

Критическое время, соответствующее завершению периода постоянной скорости сушки, составляет

$$\tau_{кр} = (u_0 - u_{кр}) / j. \quad (6.486)$$

Период падающей скорости сушки. Этому периоду отвечают в общем случае два механизма:

диффузия влаги из пор к поверхности (участок II на рис. 6.28);

удаление химически связанной (кристаллизационной) влаги (участок III на рис. 6.28).

Период падающей скорости сушки начинается при достижении критического влагосодержания $u_{кр}$, когда на поверхности материала образуются сухие островки. Если считать, что в этом периоде все сопротивление массопереносу сосредоточено внутри материала и подводящая к поверхности влага моментально отводится, то механизм массопереноса можно описать уравнением нестационарной диффузии в сферических координатах:

$$\epsilon \frac{\partial u}{\partial \tau} = D_{эфф} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial \rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{\partial u}{\partial \rho} \right), \quad (6.487)$$

где u — значение влагосодержания в момент времени τ на расстоянии ρ от центра частицы; ϵ — пористость частицы; $D_{эфф}$ — обобщенный усредненный коэффициент диффузии. Принимается, что все поры в частице и влага в них распределены равномерно.

Начальное и граничные условия таковы:

$$u = u_{кр} \quad \text{при} \quad \tau = \tau_{кр}, \quad 0 < \rho < R, \quad (6.488)$$

$$u = u_r \quad \text{при} \quad \tau > \tau_{кр}, \quad \rho = R, \quad (6.489)$$

$$du/d\rho = 0 \quad \text{при} \quad \tau > \tau_{кр}, \quad \rho = 0, \quad (6.490)$$

причем u_r характеризует влагосодержание на границе, равновесное с влагосодержанием окружающего воздуха.

Решение уравнения (6.487) с граничными условиями (6.489), (6.490) и начальным условием (6.488), полученное методом Фурье, имеет вид

$$\frac{u - u_{кр}}{u_r - u_{кр}} = 1 + \frac{2R}{\pi R} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \sin \frac{\pi n \rho}{R} \exp \left(- \frac{D \pi^2 n^2 (\tau - \tau_{кр})}{R^2} \right), \quad (6.491)$$

где

$$D = D_{эфф} / \epsilon, \quad (6.492)$$

$$u = u_{\Gamma} + (u_{\Gamma} - u_{\text{кр}}) \frac{2R}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \sin \frac{\pi n \rho}{R} \exp\left(-\frac{D \pi^2 n^2 (\tau - \tau_{\text{кр}})}{R^2}\right). \quad (6.493)$$

Экспериментально получают изменение среднего влагосодержания $\bar{u}$ во времени. Тогда исходя из определения среднего влагосодержания материала находят:

$$\bar{u} = \frac{G_{\text{вл}}}{G_{\text{су}}} = \frac{\int_0^R u \rho \gamma_M 4\pi \rho^2 d\rho}{\int_0^R \gamma_M 4\pi \rho^2 d\rho} = \frac{3}{R^3} \int_0^R u \rho^2 d\rho. \quad (6.494)$$

Подстановка уравнения (6.493) в уравнение (6.494) дает зависимость среднего влагосодержания $\bar{u}$ от времени τ в периоде удаления влаги из пор материала:

$$\begin{aligned} \bar{u} &= \frac{3}{R^3} \int_0^R u \rho^2 d\rho = \frac{3}{R^3} \int_0^R \left[u_{\Gamma} + (u_{\Gamma} - u_{\text{кр}}) \frac{2R}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \sin \frac{\pi n \rho}{R} \right. \\ &\quad \left. \exp\left(-\frac{D \pi^2 n^2 (\tau - \tau_{\text{кр}})}{R^2}\right) \right] \rho^2 d\rho = u_{\Gamma} + (u_{\Gamma} - u_{\text{кр}}) \frac{6}{\pi^2} \times \\ &\quad \times \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \exp\left(-\frac{D \pi^2 n^2 (\tau - \tau_{\text{кр}})}{R^2}\right). \end{aligned} \quad (6.495)$$

Среднее влагосодержание можно найти также интегрированием локального влагосодержания u по всему объему V сферической частицы:

$$\bar{u} = \frac{1}{V} \iiint_V u dV. \quad (6.496)$$

Тогда после перехода к сферическим координатам подстановка уравнения (6.493) в уравнение (6.496) дает

$$\begin{aligned} \bar{u} &= u_{\Gamma} + (u_{\Gamma} - u_{\text{кр}}) \frac{3}{4\pi R^3} \frac{2R}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \exp\left(-\frac{D \pi^2 n^2 (\tau - \tau_{\text{кр}})}{R^2}\right) \cdot \\ &\quad \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\pi} \sin \varphi d\varphi \int_0^R \frac{1}{\rho} \sin \frac{\pi n \rho}{R} \rho^3 d\rho, \end{aligned} \quad (6.497)$$

откуда в результате интегрирования получаем

$$\bar{u} = u_{\Gamma} + \frac{6}{\pi^2} (u_{\Gamma} - u_{\text{кр}}) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \exp\left(-\frac{D \pi^2 n^2 (\tau - \tau_{\text{кр}})}{R^2}\right). \quad (6.498)$$

Решения (6.495) и (6.498) совпадают и представляют собой знакочередующийся быстроходящийся ряд, в котором первый член намного больше остальных. Поэтому в качестве первого приближения модели кинетики сушки в рассматриваемом периоде можно использовать только первый член ряда в уравнении (6.498). В этом случае получаем

$$\bar{u} = u_r - (u_r - u_{кр}) \frac{6}{\pi^2} \exp\left(-\frac{D\pi^2(\tau - \tau_{кр})}{R^2}\right). \quad (6.499)$$

Из последнего уравнения можно найти выражение для коэффициента диффузии

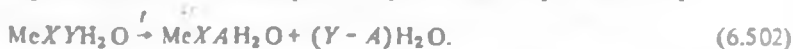
$$D = \frac{R^2}{\pi^2} \frac{\ln\left[\frac{\pi^2}{6} \frac{(\bar{u} - u_r)}{(u_{кр} - u_r)}\right]}{(\tau_{кр} - \tau)}. \quad (6.500)$$

Если радиус частиц R неизвестен, то получаем

$$\frac{D\pi^2}{R^2} = \frac{\ln\left[\frac{(u_{кр} - u_r)}{(\bar{u} - u_r)}\right] - \ln \frac{\pi^2}{6}}{\tau - \tau_{кр}}. \quad (6.501)$$

Равновесное влагосодержание u_r достигается при $\tau \rightarrow \infty$. Однако при сушке кристаллогидратов наступает момент τ_k , когда начинает разлагаться сам кристаллогидрат. В этом случае считается, что влагосодержание, соответствующее времени τ_k , равно содержанию кристаллизационной воды в чистом кристаллогидрате.

Рассмотрим теперь период разложения кристаллогидрата. Он начинается при приближении к равновесному содержанию влаги и с этого момента происходит химическая реакция разложения кристаллогидрата:



Скорость сушки для этого периода можно записать как скорость брутто химической реакции n -го порядка:

$$-\frac{du}{d\tau} = K(t)M^n. \quad (6.503)$$

Обработкой кинетического эксперимента по методу МНК можно найти K_0 , n и E (K_0 — предэкспоненциальный множитель; E — энергия активации).

Отметим, что константа скорости реакции выражается известным соотношением

$$K(t) = K_0 \exp(-E/RT). \quad (6.504)$$

Расчет сушилок на основе математической модели. Если скорость сушки постоянна, то структура потока не оказывает влияния на течение процесса и обычно такие вещества сушат в режимах, близких к полному перемешиванию, обеспечивая активное взаимодействие с теплоносителем во всем объеме. Не представляет особого труда также расчет аппаратов периодического действия и аппаратов непрерывного действия с постоянным механизмом влагопереноса.

В реальных же сушилках непрерывного действия не всегда ясно, протекает ли процесс сушки с постоянной или падающей скоростью. Лимитирующее сопротивление массопередаче может измениться за время пребы-

ния частицы в сушилке, так что сушка может начаться при массопередаче влаги с поверхности материала, затем будет сказываться влияние диффузии и, наконец, процесс перейдет во внутридиффузионную область. Положение в непрерывных сушилках усложняется тем фактом, что в каждый момент времени разные частицы слоя могут подвергаться сушке в различных режимах.

В связи с этим в настоящее время принято выполнять расчеты сушки для кинетики общего вида $u = u(\tau, t)$, комбинируя уравнение теплового баланса с уравнением

$$\bar{u} = \int_0^{\infty} C(\tau) u(\tau, t) d\tau, \quad (6.505)$$

где $\bar{u}$ — среднее на выходе из аппарата влагосодержание частиц; $C(\tau)$ — функция распределения времени пребывания частиц в аппарате; t — текущее время сушки вещества в аппарате.

Так, расчет процесса сушки, протекающий во внутридиффузионной области, выполняется на основании уравнения (6.505) с использованием модели идеального смешения и диффузионного механизма удаления влаги и выражается уравнением вида

$$\frac{\bar{u} - u_{\tau}}{u_{кр} - u_{\tau}} = \int_0^{\infty} \frac{6}{\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} \exp \left[- \frac{\tau}{\tau} \left(\frac{n^2 \pi^2 D \bar{\tau}}{R^2} + 1 \right) \right] d\left(\frac{\tau}{\tau}\right), \quad (6.506)$$

где D — коэффициент диффузии.

Данное уравнение успешно используется для решения задач проектного расчета процессов сушки, если известна функция $C(\tau)$ распределения частиц по времени пребывания в аппарате или имеется описание структуры потоков и известна кинетическая зависимость $u(\tau, \bar{\tau})$ для средней температуры по слою.

Уравнение (6.506) в принципе можно применять при кинетических и гидродинамических зависимостях, любой сложности, хотя все приведенные в литературе исследования используют в расчетах либо сложную гидродинамику и простую кинетику (только один из периодов сушки), либо наоборот (только идеальное перемешивание). Естественно, что при сложных зависимостях необходимо применение ЭВМ и специальных методов расчета.

Проектный расчет сушилки псевдоожиженного слоя. При проектировании сушилок псевдоожиженного слоя надо учитывать, что в реальных сушилках непрерывного действия не всегда ясно, в каком периоде сушки протекает процесс. Сопротивление массопередаче может изменяться за время пребывания частицы в сушилке. Задача проектирования состоит в том, чтобы рассчитанный аппарат обеспечивал поддержание на выходе из него заданное среднее влагосодержание материала.

Расчет времени пребывания материала в аппарате. Если известно изменение влагосодержания материала во времени при заданном температурном режиме, а также известна функция распределения высушиваемого вещества по времени пребывания, то среднее влагосодержание на выходе из аппарата определяется из уравнения

$$\bar{u}_k = \int_0^{\infty} u(\tau, \bar{r}) C(\tau) d\tau \quad (6.507)$$

или, после перехода к безразмерному времени $\theta = \tau/\bar{r}$ и безразмерной функции распределения времени пребывания $C(\theta)$, уравнением

$$\bar{u}_k = \int_0^{\infty} u(\theta, \bar{r}) C(\theta) d\theta. \quad (6.508)$$

Функция $u(\theta, \bar{r})$ описывает механизм влагопереноса при заданной температуре $\bar{r}$ в сушильной камере.

Процесс сушки кристаллогидратов распадается на три периода, в каждом из которых влагоперенос описывается характерной для этого периода кинетической моделью. Так, в первом периоде, когда скорость сушки до критического времени, соответствующего критическому влагосодержанию, остается постоянной, зависимость влагосодержания от времени получается в результате решения уравнения

$$j = - \frac{du}{d\tau}, \quad (6.509)$$

откуда

$$u = u_0 - j\tau. \quad (6.510)$$

Второй период характеризуется удалением внутренней влаги, скорость которого описывается уравнением диффузии в сферических координатах при соответствующих начальном и граничном условиях:

$$\epsilon \frac{\partial u}{\partial \tau} = D_{\text{эфф}} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial \rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{\partial u}{\partial \rho} \right) \quad (6.511)$$

$$u = u_{кр} \quad \text{при} \quad \tau = 0, \quad 0 < \rho < R; \quad (6.512)$$

$$u = u_r \quad \text{при} \quad \tau > 0, \quad \rho = R; \quad (6.513)$$

$$\partial u / \partial \rho = 0 \quad \text{при} \quad \tau > 0, \quad \rho = 0. \quad (6.514)$$

Приближенное решение уравнения (6.511) имеет вид

$$u = u_r + (u_{кр} - u_r) \exp \left[- \frac{D_{\text{эфф}} \pi^2 (\bar{r} - \theta_{кр})}{R^2} \right]. \quad (6.515)$$

В третьем периоде (разложение кристаллогидрата) влагоперенос описывается кинетическим уравнением $\frac{d\bar{u}}{d\tau} = -K\bar{u}^n$, из которого при интегрировании с учетом условий $\theta = \theta_k$, $u = u_r$ и $n = 1$ получаем

$$u = u_r \exp [-K\bar{r}(\theta - \theta_k)]. \quad (6.516)$$

Смена механизма влагопереноса происходит в точках $\theta = \theta_{кр}$ и $\theta = \theta_k$ (они находятся экспериментально), поэтому интеграл уравнения (6.515) распадается на три слагаемых:

$$\bar{u}_k = \int_0^{\theta_{кр}} u_1(\theta, t) C(\theta) d\theta + \int_{\theta_{кр}}^{\theta_k} u_2(\theta, t) C(\theta) d\theta + \int_{\theta_k}^{\infty} u_3(\theta, t) C(\theta) d\theta = I_1 + I_2 + I_3, \quad (6.517)$$

где u_1, u_2, u_3 — влагосодержание частиц в соответствующие периоды сушки; $C(\theta)$ — функция распределения частиц на выходе из аппарата по времени пребывания, которая характеризует гидродинамику процесса. Так, если структура потока частиц в аппарате описывается моделью полного перемешивания (МИС), то

$$C(\theta) = e^{-\theta}. \quad (6.518)$$

Тогда расчетное уравнение получается из (6.517) при подстановке в него соотношения (6.518) и интегрирования в определенных пределах.

Значения интегралов I_1, I_2, I_3 таковы:

$$I_1 = \int_0^{\theta_{кр}} (u_0 - j\tau\theta) e^{-\theta} d\theta = u_0 (1 - e^{-\theta_{кр}}) - j\tau \times \\ \times [1 - e^{-\theta_{кр}} (\theta_{кр} + 1)], \quad (6.519)$$

$$I_2 = \int_{\theta_{кр}}^{\theta_k} \left[u_r + (u_{кр} - u_r) e^{-\frac{D\pi^2}{R^2} \tau(\theta - \theta_{кр})} \right] e^{-\theta} d\theta = \\ = u_r (e^{-\theta_{кр}} - e^{-\theta_k}) + \frac{u_{кр} - u_r}{D \frac{\pi^2}{R^2} \tau + 1} \left[e^{-\theta_{кр}} - e^{-\frac{D\pi^2}{R^2} \tau(\theta_k - \theta_{кр}) - \theta_{кр}} \right], \quad (6.520)$$

$$I_3 = \int_{\theta_k}^{\infty} u_r e^{-k\tau(\theta - \theta_k)} e^{-\theta} d\theta = \frac{u_r}{1 + K\tau} e^{-\theta_k}. \quad (6.521)$$

Алгоритм расчета аппарата, т.е. нахождения среднего времени пребывания, состоит в следующем:

1. Задают входные параметры (температурный режим сушильной камеры t , температуру t_0 и влажность наружного воздуха φ , среднее влагосодержание кристаллогидрата на выходе $\bar{u}_k$).

2. По уравнениям (6.481) — (6.486) рассчитывают скорость сушки в первом периоде j .

3. По уравнениям (6.498) — (6.503) находят $\bar{D}$ и K .

4. Определяют критическое и конечное время сушки, соответствующие $u_{кр}$ и u_r .

5. Задавая начальное приближение среднего времени пребывания $\bar{t}_0$, с учетом $\theta = \tau/\bar{t}_0$ рассчитывают ΣI_i по уравнениям (6.519) — (6.521).

6. Результат расчета сравнивают с заданным $\bar{u}_k$. Если разность меньше заданной точности, т.е.

$$|\bar{u}_k - \sum_{j=1}^3 I_j| < \epsilon_1, \quad (6.522)$$

то расчет заканчивают. В противном случае берут новое приближение $\bar{\tau}_i$ и расчет повторяют до тех пор, пока не будет выполнено условие (6.522).

Определив среднее время пребывания $\bar{\tau}$ при заданной нагрузке и температуре в камере, можно найти объем конусной части камеры через вес слоя в неподвижном состоянии:

$$G = \bar{\tau} G_1 \quad (6.523)$$

или

$$V = \frac{G}{\gamma_n} = \frac{\bar{\tau} G_1}{\gamma_n}, \quad (6.524)$$

При заданных конструктивных параметрах: угле конуса 60° и отношении верхнего и нижнего диаметров конуса $D_{\text{ап}}/d = 4$ определяют размеры аппарата. При этом высота цилиндрической части берется вдвое больше конусной, т.е. $h_{\text{ц}} = 2h_k$.

Объемный расход воздуха определяют из условий фонтанирования.

Определение расхода воздуха. Воздух играет двойную роль в процессе: с одной стороны, как осушающий агент; с другой, являясь взвешивающим агентом, он обеспечивает кипение и фонтанирование слоя.

Существование взвешенного слоя определяется двумя границами:

1) начало псевдооживления, когда слой из фильтрующего переходит во взвешенный, характеризуемое критической скоростью газа; при этом порозность $\epsilon = 0,4$;

2) условия витания $w_{\text{вит}}$, когда частицы уносятся воздухом, при этом $\epsilon = 1$.

Таким образом, рабочая скорость должна быть заключена в пределах

$$w_{\text{кр}} < w < w_{\text{вит}} \quad (6.525)$$

Расчет рабочего диапазона скоростей воздуха проводят по эмпирическим уравнениям. Так, критическую скорость псевдооживления определяют по уравнению

$$\text{Re}_{\text{кр}} = \frac{A_{\Gamma}}{1400 + 5,22 \sqrt{A_{\Gamma}}}, \quad (6.526)$$

где

$$\text{Re} = \frac{w d_p}{\nu}; \quad d_p - \text{диаметр частиц}; \quad \nu - \text{кинематическая вязкость воздуха}; \quad A_{\Gamma} = \frac{d_p^3 \rho_M \epsilon}{\nu^2 \rho_{\Gamma}}; \quad \rho_M, \rho_{\Gamma} - \text{плотности материала и газа}.$$

Скорость витания рассчитывают с помощью аналогичной зависимости

$$Re_{\text{внт}} = \frac{\Delta t}{18 + 0.6 \sqrt{\Delta t}} \quad (6.527)$$

Математическая модель сушки с учетом неоднородности псевдоожженного слоя. Изложенная выше процедура расчета сушки псевдоожженного слоя основана на двух допущениях: 1) температура слоя постоянна; 2) осушающий газ является однородным, т.е. газ в псевдоожженном слое не разделяется на охлаждающий газ и фазу газовых пузырей. Хотя при определенных условиях эти допущения и являются справедливыми, во многих случаях необходима модель, отражающая реальную структуру псевдоожженного слоя.

Рассмотрим физическую картину процесса псевдоожжения. *Псевдоожженным* называется слой, в котором легкие твердые частицы приходят в состояние, подобное жидкому, вследствие контакта с газом. При низких скоростях поток газа просто фильтруется через пустоты между частицами; в таком состоянии они составляют неподвижный слой. С увеличением скорости потока частицы будут двигаться друг относительно друга и совершать колебательные движения с малыми амплитудами; в таком состоянии частицы образуют так называемый расширенный слой. При более высокой скорости потока достигается состояние, когда почти все частицы составляют нечто вроде суспензии с текущим вверх потоком газа. В этой области трение между частицей и потоком компенсируется весом частицы. Такое состояние слоя называется *состоянием минимального псевдоожжения*. При дальнейшем увеличении скорости потока начинают появляться неоднородности в виде пузырей газа, проходящих через слой без взаимодействия с частицами. Этот слой обычно и называется *псевдоожженным*. Следует отметить, что между газовыми пузырями и плотной фазой происходит газовый обмен. При движении мелких пузырей газ, фильтрующийся через плотную фазу, движется вверх быстрее пузыря; следовательно, прохождение газа в пузыре представляет для газа путь наименьшего сопротивления. Газ входит в нижнюю часть пузыря, а выходит из верхней. Часть газа в виде кольцевой пленки перемещается вместе с пузырем. Скорость движения крупных пузырей больше скорости движения газа в плотной фазе. Поэтому при их движении газовый поток входит в пузырь у основания, покидает его у свода и, огибая пузырь, снова поступает в его нижнюю часть. Зона вокруг пузыря, пронизываемая циркулирующими струями газа, называется *облаком*.

Движение газа в псевдоожженном слое может быть описано с помощью двухфазной модели, согласно которой слой представляется состоящим из двух фаз: фазы пузырей и плотной фазы (которая включает частицы и охлаждающий газ и сохраняется при минимальной скорости ожжения). При этом избыточный поток охлаждающего газа по отношению к минимальному охлаждающему потоку проходит через слой в виде пузырей (рис. 6.29). Для дальнейшего вывода модели сделаем следующие допущения: 1) фаза пузырей, охлаждающий газ и твердые частицы считаются непрерывными; 2) фаза пузырей свободна от твердых частиц и размер пузырей одинаков;

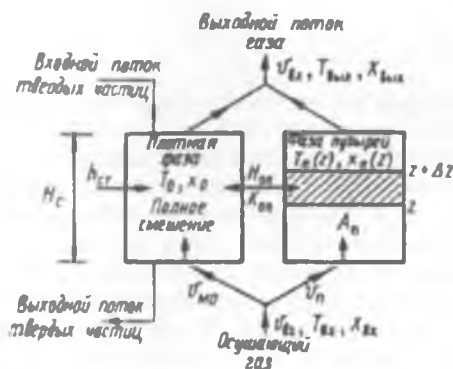


Рис. 6.29. Схематическое представление структуры псевдоожженного слоя в сушилке: H_c — высота псевдоожженного слоя; $v_{вх}$ — скорость газа в слое; $T_{вх}$ — температура газа на входе; $X_{вх}$ — влагосодержание газа на входе; T_0, X_0 — температура и влагосодержание плотной фазы; T_n, X_n — температура и влагосодержание в фазе пузырей; z — вертикальная координата; $H_{оп}$ — объемный коэффициент теплопередачи между фазой пузырей и плотной фазой; $k_{оп}$ — коэффициент газового обмена между фазой пузырей и плотной фазой, отнесенный к единице объема пузырей

3) пузыри газа обмениваются массой и энергией только с оживающим газом; 4) оживающий газ и твердые частицы полностью перемешаны; 5) твердые частицы подаются и удаляются с постоянной скоростью; 6) внутреннее сопротивление твердых частиц массово- и теплопередаче пренебрежимо мало; 7) частицы имеют одинаковый размер; 8) температура и влагосодержание каждой частицы зависят от ее времени пребывания в сушилке.

При сделанных допущениях распределение времени пребывания частиц в сушилке определяется выражением

$$C(t) = e^{-t/\bar{t}} / \bar{t}. \quad (6.528)$$

Запишем теперь уравнения сохранения массы для каждой из фаз псевдоожженного слоя в сушилке.

Рассмотрим сначала фазу пузырей. Баланс влаги для выделенного элемента фазы высотой Δz (рис. 6.29) приводит к уравнению

$$\frac{v_n}{\delta_n} \frac{dx_n}{dz} = k_{он} (x_0 - x_n) \quad (6.529)$$

со следующим граничным условием:

$$x_n = x_{вх} \quad \text{при} \quad z = 0. \quad (6.530)$$

Здесь v_n — скорость фазы пузырей, отнесенная ко всей площади псевдооживленного слоя; δ_n — доля псевдооживленного слоя, занимаемая фазой пузырей.

После интегрирования уравнения (6.529) получаем

$$x_n = x_0 - (x_0 - x_{вх}) \exp \left[- \frac{k_{оп} \delta_n}{v_n} z \right]. \quad (6.531)$$

Параметры, входящие в уравнение (6.538), оцениваются из следующих соотношений. Объемная доля фазы пузырей определяется скоростью газа в слое $v_{вх}$, скоростью газа при минимальном псевдооживлении $v_{мо}$ и скоростью движения единичного пузыря $v_{1п}$ и выражается формулой

$$\delta_n = \frac{(v_{вх} - v_{мо})}{(v_{вх} - v_{мо}) + v_{1п}}, \quad (6.532)$$

где

$$v_{1п} = 0,711 (gd_n)^{0,5}; \quad (6.533)$$

$v_{мо}$ — скорость газа при минимальном псевдооживлении, определяемая соотношением

$$v_{мо} = \frac{\mu_r}{d_ч \rho_r} \left((33,7)^2 + 0,0408 \frac{d_ч^3 \rho_r (\rho_ч - \rho_r) g}{\mu_r^2} \right)^{0,5} - 33,7; \quad (6.534)$$

d_n — диаметр пузыря газа; $d_ч$ — диаметр твердых частиц; $\rho_ч, \rho_r$ — соответственно плотность влажных частиц и газа; μ_r — вязкость газа. Скорость газа в фазе пузырей v_n выражается формулой

$$v_n = v_{вх} - v_{мо}. \quad (6.535)$$

Коэффициент газового обмена $k_{оп}$ между фазой пузырей и плотной фазой определяется соотношением

$$k_{оп} = \frac{1}{\frac{1}{k_1} + \frac{1}{k_2}}, \quad (6.536)$$

где k_2 — коэффициент газового обмена между фазой пузырей и облаком:

$$k_2 = 4,5 \frac{v_{мо}}{d_n} + 5,85 \frac{D_r^{1/2} k^{1/4}}{d_n^{5/4}}; \quad (6.537)$$

k_1 — коэффициент газового обмена между облаком и плотной фазой:

$$k_1 = 6,78 \left(\frac{\epsilon_{мо} D_{эфф} v_n}{d_n^3 \delta_n} \right)^{1/2}; \quad (6.538)$$

$$D_{эфф} = \epsilon_{мо} D_r. \quad (6.539)$$

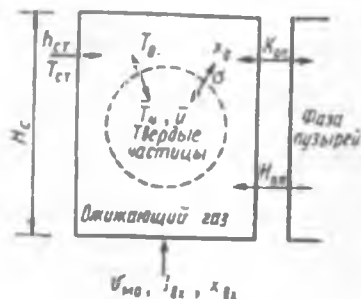


Рис. 6.30. Схема переноса массы и энергии между твердыми частицами и оживающим газом

В уравнениях (6.537)–(6.539) D_T — коэффициент молекулярной диффузии в газе; $D_{эф}$ — эффективный коэффициент молекулярной диффузии в газе; ϵ_{mo} — доля свободного объема при минимальном псевдооживлении, равная

$$\epsilon_{mo} = 0,586 \varphi^{-0,72} \left[\frac{\mu_r^2}{\rho_r (\rho_v - \rho_r) g d_v^3} \right]^{0,029} \left(\frac{\rho_r}{\rho_v} \right)^{0,021}; \quad (6.540)$$

φ — фактор формы частиц.

Рассмотрим теперь уравнение сохранения массы для оживающего газа. Из баланса влаги для оживающего газа (рис. 6.30) получаем

$$\begin{aligned} & (v_{mo} A_c) \rho_r (x_{nx} - x_0) + \int_0^{H_c} A_n \rho_r k_{on} (x_n - x_0) dz + \\ & + (H_c A_c) (1 - \delta_n) (1 - \epsilon_{mo}) \left(\frac{G}{d_v} \right) \sigma (\bar{x}_v^* - x_0) = 0, \end{aligned} \quad (6.541)$$

где $\bar{x}_v^*$ — среднее влагосодержание газа у поверхности частиц; σ — коэффициент испарения.

Если обозначить среднее влагосодержание пузырей газа через $\bar{x}_n$, т.е. положить

$$x_n = \frac{1}{H_c} \int_0^{H_c} x_n dz, \quad (6.542)$$

то уравнение (6.541) можно представить в виде

$$\begin{aligned} & \rho_r \frac{v_{mo}}{H_c \delta_n} (x_0 - x_{nx}) = \rho_r k_{on} (\bar{x}_n - x_0) + \\ & + \frac{(1 - \epsilon_{mo}) (1 - \delta_n)}{\delta_n} \frac{G}{d_v} \sigma (\bar{x}_v^* - x_0). \end{aligned} \quad (6.543)$$

Коэффициент испарения σ в уравнении (6.543) определяется формулой

$$\sigma = \frac{h_v \rho_r D_r}{\lambda_r}, \quad (6.544)$$

где h_v — коэффициент теплопередачи между осушающим газом и твердыми частицами:

$$h_v = C_r v_{nx} \rho_r J Pr_r^{-2/3}; \quad (6.545)$$

$$J = \frac{Nu_v}{Re_v Pr_r^{1/3}} = \begin{cases} 1,77 Re_v^{-0,44}, & Re_v > 30; \\ 570 Re_v^{-0,78}, & Re_v < 30 \end{cases}; \quad (6.546)$$

$$Nu_v = \frac{h_v d_v}{\lambda_r}; \quad Pr_r = \frac{c_r \mu_r}{\lambda_r}; \quad Re_v = \frac{v_{nx} \rho_r d_v}{(1 - \epsilon_{mo}) \mu_r}; \quad (6.547)$$

c_r — теплоемкость газа; λ_r — коэффициент теплопроводности газа.

Среднее влагосодержание осушающего газа у поверхности частиц $\bar{x}_v^*$ выражается через функцию распределения частиц по времени пребывания в аппарате:

$$\bar{x}_v^* = \int_0^\infty \frac{1}{T} \exp\left(-\frac{t}{T}\right) x_v^* dt, \quad (6.548)$$

где x_v^* определяется по уравнению (6.484) при температуре частицы T_v .

Уравнение сохранения массы влаги для твердой частицы записывается в виде

$$\rho_{tv} \frac{du}{dt} = - \left(1 + \frac{\rho_{tv}}{\rho_v} u_{кр} \right) \frac{6}{d_v} \sigma (x_v^* - x_0) \quad (6.549)$$

с начальным условием

$$u = u_0 \quad \text{при} \quad t = 0. \quad (6.550)$$

Здесь ρ_{tv} , ρ_v — плотность сухих твердых частиц и воды соответственно; $u_{кр}$ — критическое влагосодержание частиц. Среднее влагосодержание частиц $\bar{u}$ составляет

$$\bar{u} = \int_0^\infty \frac{1}{T} \exp\left(-\frac{t}{T}\right) u dt. \quad (6.551)$$

Запишем уравнения сохранения энергии для каждой из фаз. Для фазы пузырей получим

$$\rho_r \frac{v_n}{a_n} \frac{dI_n}{dz} = H_{on} (T_0 - T_n) + \rho_r k_{on} (x_0 - x_n) I_{vo}, \quad (6.552)$$

где энтальпия газовых пузырей I_n и энтальпия паров воды в оживающем газе I_{vo} определяются выражениями

$$I_n = c_r (T_n - T) + x_n [c_{vn} (T_n - T_{ст}) + \gamma_0], \quad (6.553)$$

$$I_{vo} = c_{vn} (T_0 - T_{ст}) + \gamma_0, \quad (6.554)$$

c_{vn} — теплоемкость паров воды; γ_0 — теплота парообразования. Из уравнения (6.531) следует

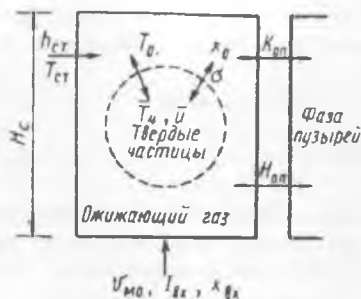


Рис. 6.30. Схема переноса массы и энергии между твердыми частицами и оживающим газом

В уравнениях (6.537)–(6.539) D_T — коэффициент молекулярной диффузии в газе; $D_{эфф}$ — эффективный коэффициент молекулярной диффузии в газе; $\epsilon_{м0}$ — доля свободного объема при минимальном псевдооживлении, равная

$$\epsilon_{м0} = 0,586 \varphi^{-0,72} \left[\frac{\mu_{гг}^2}{\rho_{гг} (\rho_{чг} - \rho_{гг}) g d_{чг}^3} \right]^{0,029} \left(\frac{\rho_{гг}}{\rho_{чг}} \right)^{0,021}; \quad (6.540)$$

φ — фактор формы частиц.

Рассмотрим теперь уравнение сохранения массы для оживающего газа. Из баланса влаги для оживающего газа (рис. 6.30) получаем

$$(\nu_{м0} A_c) \rho_{гг} (x_{вх} - x_0) + \int_0^{H_c} A_n \rho_{гг} k_{оп} (x_n - x_0) dz + (H_c A_c) (1 - \delta_n) (1 - \epsilon_{м0}) \left(\frac{G}{d_{чг}} \right) \bar{\sigma} (\bar{x}_ч^* - x_0) = 0, \quad (6.541)$$

где $\bar{x}_ч^*$ — среднее влагосодержание газа у поверхности частиц; σ — коэффициент испарения.

Если обозначить среднее влагосодержание пузырей газа через $\bar{x}_н$, т.е. положить

$$x_n = \frac{1}{H_c} \int_0^{H_c} x_n dz, \quad (6.542)$$

то уравнение (6.548) можно представить в виде

$$\rho_{гг} \frac{\nu_{м0}}{H_c \delta_n} (x_0 - x_{вх}) = \rho_{гг} k_{оп} (\bar{x}_н - x) + \frac{(1 - \epsilon_{м0}) (1 - \delta_n)}{\delta_n} \frac{G}{d_{чг}} \sigma (\bar{x}_ч^* - x_0). \quad (6.543)$$

Коэффициент испарения σ в уравнении (6.543) определяется формулой

$$\sigma = \frac{h_{чг} \rho_{гг} D_{гг}}{\lambda_{гг}}, \quad (6.544)$$

где h_q — коэффициент теплопередачи между осушающим газом и твердыми частицами:

$$h_q = C_{\Gamma} \nu_{\text{вх}} \rho_{\Gamma} J \text{Pr}_{\Gamma}^{-2/3}; \quad (6.545)$$

$$J = \frac{\text{Nu}_q}{\text{Re}_q \text{Pr}_{\Gamma}^{1/3}} = \begin{cases} 1,77 \text{Re}_q^{-0,44}, & \text{Re}_q \geq 30; \\ 570 \text{Re}_q^{-0,78}, & \text{Re}_q < 30; \end{cases} \quad (6.546)$$

$$\text{Nu}_q = \frac{h_q d_q}{\lambda_{\Gamma}}; \quad \text{Pr}_{\Gamma} = \frac{c_{\Gamma} \mu_{\Gamma}}{\lambda_{\Gamma}}; \quad \text{Re}_q = \frac{\nu_{\text{вх}} \rho_{\Gamma} d_q}{(1 - \epsilon_{\text{мо}}) \mu_{\Gamma}}; \quad (6.547)$$

c_{Γ} — теплоемкость газа; λ_{Γ} — коэффициент теплопроводности газа.

Среднее влагосодержание осушающего газа у поверхности частиц $\bar{x}_q^*$ выражается через функцию распределения частиц по времени пребывания в аппарате:

$$\bar{x}_q^* = \int_0^{\infty} \frac{1}{t} \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) x_q^* dt, \quad (6.548)$$

где x_q^* определяется по уравнению (6.484) при температуре частицы T_q .

Уравнение сохранения массы влаги для твердой частицы записывается в виде

$$\rho_{\text{ТВ}} \frac{du}{dt} = -\left(1 + \frac{\rho_{\text{ТВ}}}{\rho_{\text{в}}} u_{\text{кр}}\right) \frac{6}{d_q} \sigma (x_q^* - x_0) \quad (6.549)$$

с начальным условием

$$u = u_0 \quad \text{при} \quad t = 0. \quad (6.550)$$

Здесь $\rho_{\text{ТВ}}$, $\rho_{\text{в}}$ — плотности сухих твердых частиц и воды соответственно; $u_{\text{кр}}$ — критическое влагосодержание частиц. Среднее влагосодержание частиц $\bar{u}$ составляет

$$\bar{u} = \int_0^{\infty} \frac{1}{t} \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) u dt. \quad (6.551)$$

Запишем уравнения сохранения энергии для каждой из фаз. Для фазы пузырей получим

$$\rho_{\Gamma} \frac{\nu_{\Pi}}{\sigma_{\Pi}} \frac{dI_{\Pi}}{dz} = H_{\text{оп}} (T_0 - T_{\Pi}) + \rho_{\Gamma} k_{\text{оп}} (x_0 - x_{\Pi}) I_{\text{во}}, \quad (6.552)$$

где энтальпия газовых пузырей I_{Π} и энтальпия паров воды в оживающем газе $I_{\text{во}}$ определяются выражениями

$$I_{\Pi} = c_{\Gamma} (T_{\Pi} - T) + x_{\Pi} [c_{\text{вп}} (T_{\Pi} - T_{\text{ст}}) + \gamma_0], \quad (6.553)$$

$$I_{\text{во}} = c_{\text{вп}} (T_0 - T_{\text{ст}}) + \gamma_0, \quad (6.554)$$

$c_{\text{вп}}$ — теплоемкость паров воды; γ_0 — теплота парообразования.

Из уравнения (6.531) следует

$$k_{\text{оп}}(x_0 - x_n) = k_{\text{оп}}(x_0 - x_{\text{вх}}) \exp\left(-\frac{k_{\text{оп}} \delta_n}{\nu_n} z\right). \quad (6.555)$$

Подставляя теперь выражения (6.529), (6.553)–(6.555) в уравнение (6.552), получаем

$$\frac{dT_n}{dz} = \frac{T_0 - T_n}{(c_r + c_{\text{вп}} x_n)} \left[\frac{H_{\text{оп}} \delta_n}{\nu_n \rho_r} + \frac{\delta_n k_{\text{оп}} (x_0 - x_{\text{вх}}) c_{\text{вп}}}{\nu_n} \times \right. \\ \left. \times \exp\left(-\frac{k_{\text{оп}}}{\nu_n} \delta_n z\right) \right], \quad (6.556)$$

где $H_{\text{оп}}$ – объемный коэффициент теплопередачи между плотной фазой и фазой пузырей, отнесенный к единице объема пузырей, равный

$$H_{\text{оп}} = \frac{1}{\frac{1}{H_1} + \frac{1}{H_2}}. \quad (6.557)$$

Здесь H_1 – объемный коэффициент теплопередачи между плотной фазой и облаком, отнесенный к единице объема пузырей:

$$H_1 = 6,78 (\rho_r c_r \lambda_r)^{1/2} \left(\frac{\epsilon_{\text{мо}} \nu_n}{d_n^3 \delta_n} \right)^{1/2}, \quad (6.558)$$

H_2 – объемный коэффициент теплопередачи между облаком и пузырями, отнесенный к единице объема пузырей:

$$H_2 = 4,5 \frac{\nu_{\text{мо}} \rho_r c_r}{d_n} + 5,85 \frac{(\lambda_r \rho_r c_r)^{1/2}}{d_n^{5/4}} g^{1/4}. \quad (6.559)$$

Граничное условие для уравнения (6.556) записывается в виде

$$T_n = T_{\text{вх}} \quad \text{при} \quad z = 0. \quad (6.560)$$

Уравнение сохранения энергии для охлаждающего газа имеет вид

$$(\nu_{\text{мо}} A_c) \rho_r (I_{\text{вх}} - I_0) + (H_c A_c) (1 - \delta_n) \times \\ \times (1 - \epsilon_{\text{мо}}) \frac{6}{d_q} \sigma (\bar{x}_q^* - x_0) \bar{T}_{\text{вп}} + \int_0^{H_c} A_n H_{\text{оп}} (T_n - T_0) dz + \\ + S_{\text{ст}} h_{\text{ст}} (T_{\text{ст}} - T_0) - \int_0^{H_c} \rho_r A_n k_{\text{оп}} (x_0 - x_n) I_{\text{во}} dz - \\ - (H_c A_c) (1 - \delta_n) (1 - \epsilon_{\text{мо}}) \frac{6}{d_q} h_q (T_0 - \bar{T}_q) = 0, \quad (6.561)$$

где средняя энтальпия паров воды у поверхности частиц $\bar{T}_{\text{вп}}$ определяется формулой

$$\bar{T}_{\text{вп}} = c_{\text{вп}} (\bar{T}_q - T_{\text{ст}}) + \gamma_0; \quad (6.562)$$

$I_{\text{вх}}$ – энтальпия газа на входе:

$$I_{\text{вх}} = c_r (T_{\text{вх}} - T_c) + x_{\text{вх}} [c_{\text{вп}} (T_{\text{вх}} - T_c) + \gamma_0]; \quad (6.563)$$

I_0 – энтальпия охлаждающего газа:

$$I_0 = c_r (T_0 - T_c) + x_0 [c_{\text{вп}} (T_0 - T_c) + \gamma_0]; \quad (6.564)$$

$\bar{T}_q$ – средняя температура частиц:

$$\bar{T}_q = \int_0^\infty \frac{1}{t} \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) T_q dt; \quad (6.565)$$

T_c – температура в стандартном состоянии.

Определим среднюю температуру газовых пузырей $\bar{T}_n$ и удельную теплопередающую поверхность стенок сушилки $a_{\text{ст}}$ по формулам

$$\bar{T}_n = \frac{1}{H_c} \int_0^{H_c} T_n dz, \quad (6.566)$$

$$a_{\text{ст}} = S_{\text{ст}} / V, \quad (6.567)$$

где $S_{\text{ст}}$ – теплопередающая поверхность стенок сушилки; V – объем слоя.

Подставляя выражения (6.562)–(6.567) в уравнение (6.561), получим

$$\frac{\rho_r \nu_{\text{мо}}}{H_c} \left\{ c_r (T_{\text{вх}} - T_c) + x_{\text{вх}} [c_{\text{вп}} (T_{\text{вх}} - T_c) + \gamma_0] - \right. \\ \left. - c_r (T_0 - T_c) - x_0 [c_{\text{вп}} (T_0 - T_c) + \gamma_0] \right\} + \delta_n H_{\text{оп}} \times \\ \times (\bar{T}_n - T_0) + (1 - \delta_n) (1 - \epsilon_{\text{мо}}) \frac{6\sigma}{d_q} (\bar{x}_q^* - x_0) \times \\ \times \{ c_{\text{вп}} (\bar{T}_q - T_c) + \gamma_0 \} + a_{\text{ст}} h_{\text{ст}} (T_{\text{ст}} - T_0) - \\ - (1 - \delta_n) (1 - \epsilon_{\text{мо}}) \frac{6}{d_q} h_q (T_0 - \bar{T}_q) - \rho_r \delta_n k_{\text{оп}} \times \\ \times (x_0 - x_n) [c_{\text{вп}} (T_0 - T_c) + \gamma_0] = 0, \quad (6.568)$$

или

$$\frac{\rho_r \nu_{\text{мо}}}{H_c} \left\{ c_r (T_0 - T_{\text{вх}}) + (x_0 - x_{\text{вх}}) \gamma_0 + c_{\text{вп}} [(T_0 - T_c) x_0 - \right. \\ \left. - (T_{\text{вх}} - T_c) x_{\text{вх}}] \right\} = \delta_n H_{\text{оп}} (\bar{T}_n - T_0) + (1 - \delta_n) \times \\ \times (1 - \epsilon_{\text{мо}}) \frac{6}{d_q} \left\{ \sigma (\bar{x}_q^* - x_0) [c_{\text{вп}} (\bar{T}_q - T_c) + \gamma_0] - \right. \\ \left. - h_q (T_0 - \bar{T}_q) \right\} + \rho_r \delta_n k_{\text{оп}} (\bar{x}_n - x_0) [c_{\text{вп}} (T_0 - T_c) - \\ - \gamma_0] + a_{\text{ст}} h_{\text{ст}} (T_{\text{ст}} - T_0). \quad (6.569)$$

$$k_{оп}(x_0 - x_n) = k_{оп}(x_0 - x_{вк}) \exp\left(-\frac{k_{оп}\delta_n}{\nu_n} z\right). \quad (6.555)$$

Подставляя теперь выражения (6.529), (6.553)–(6.555) в уравнение (6.552), получаем

$$\frac{dT_n}{dz} = \frac{T_0 - T_n}{(c_\Gamma + c_{вп}x_n)} \left[\frac{H_{оп}\delta_n}{\nu_n \rho_\Gamma} + \frac{\delta_n k_{оп}(x_0 - x_{вк})c_{вп}}{\nu_n} \times \right. \\ \left. \times \exp\left(-\frac{k_{оп}}{\nu_n} \delta_n z\right) \right], \quad (6.556)$$

где $H_{оп}$ – объемный коэффициент теплопередачи между плотной фазой и фазой пузырей, отнесенный к единице объема пузырей, равный

$$H_{оп} = \frac{1}{\frac{1}{H_1} + \frac{1}{H_2}}. \quad (6.557)$$

Здесь H_1 – объемный коэффициент теплопередачи между плотной фазой и облаком, отнесенный к единице объема пузырей:

$$H_1 = 6,78 (\rho_\Gamma c_\Gamma \lambda_\Gamma)^{1/2} \left(\frac{\epsilon_{мо} \nu_n}{d_n^3 \delta_n} \right)^{1/2}, \quad (6.558)$$

H_2 – объемный коэффициент теплопередачи между облаком и пузырями, отнесенный к единице объема пузырей:

$$H_2 = 4,5 \frac{\nu_{мо} \rho_\Gamma c_\Gamma}{d_n} + 5,85 \frac{(\lambda_\Gamma \rho_\Gamma c_\Gamma)^{1/2}}{d_n^{5/4}} g^{1/4}. \quad (6.559)$$

Граничное условие для уравнения (6.556) записывается в виде

$$T_n = T_{вк} \quad \text{при} \quad z = 0. \quad (6.560)$$

Уравнение сохранения энергии для охлаждающего газа имеет вид

$$(\nu_{мо} A_c) \rho_\Gamma (I_{вк} - I_0) + (H_c A_c) (1 - \delta_n) \times \\ \times (1 - \epsilon_{мо}) \frac{6}{d_q} \sigma (\bar{x}_q^* - x_0) \bar{I}_{вп} + \int_0^{H_c} A_n H_{оп} (T_n - T_0) dz + \\ + S_{ст} h_{ст} (T_{ст} - T_0) - \int_0^{H_c} \rho_\Gamma A_n k_{оп} (x_0 - x_n) I_{в0} dz - \\ - (H_c A_c) (1 - \delta_n) (1 - \epsilon_{мо}) \frac{6}{d_q} h_q (T_0 - \bar{T}_q) = 0, \quad (6.561)$$

где средняя энтальпия паров воды у поверхности частиц $\bar{I}_{вп}$ определяется формулой

$$\bar{I}_{вп} = c_{вп} (\bar{T}_q - T_{ст}) + \gamma_0; \quad (6.562)$$

$I_{вх}$ — энтальпия газа на входе:

$$I_{вх} = c_r (T_{вх} - T_c) + x_{вх} [c_{вп} (T_{вх} - T_c) + \gamma_0]; \quad (6.563)$$

I_0 — энтальпия охлаждающего газа:

$$I_0 = c_r (T_0 - T_c) + x_0 [c_{вп} (T_0 - T_c) + \gamma_0]; \quad (6.564)$$

$\bar{T}_q$ — средняя температура частиц:

$$\bar{T}_q = \int_0^\infty \frac{1}{t} \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) T_q dt; \quad (6.565)$$

T_c — температура в стандартном состоянии.

Определим среднюю температуру газовых пузырей $\bar{T}_п$ и удельную теплотеплопередающую поверхность стенок сушилки $a_{ст}$ по формулам

$$\bar{T}_п = \frac{1}{H_c} \int_0^{H_c} T_п dz, \quad (6.566)$$

$$a_{ст} = S_{ст}/V, \quad (6.567)$$

где $S_{ст}$ — теплопередающая поверхность стенок сушилки; V — объем слоя.

Подставляя выражения (6.562)–(6.567) в уравнение (6.561), получим

$$\begin{aligned} & \frac{\rho_r \nu_{мо}}{H_c} \left\{ c_r (T_{вх} - T_c) + x_{вх} [c_{вп} (T_{вх} - T_c) + \gamma_0] - \right. \\ & \left. - c_r (T_0 - T_c) - x_0 [c_{вп} (T_0 - T_c) + \gamma_0] \right\} + \delta_п H_{оп} \times \\ & \times (\bar{T}_п - T_0) + (1 - \delta_п) (1 - \epsilon_{мо}) \frac{6\sigma}{d_q} (\bar{x}_q^* - x_0) \times \\ & \times [c_{вп} (\bar{T}_q - T_c) + \gamma_0] + a_{ст} h_{ст} (T_{ст} - T_0) - \\ & - (1 - \delta_п) (1 - \epsilon_{мо}) \frac{6}{d_q} h_q (T_0 - \bar{T}_q) - \rho_r \delta_п k_{оп} \times \\ & \times (x_0 - x_п) [c_{вп} (T_0 - T_c) + \gamma_0] = 0, \end{aligned} \quad (6.568)$$

или

$$\begin{aligned} & \frac{\rho_r \nu_{мо}}{H_c} \left\{ c_r (T_0 - T_{вх}) + (x_0 - x_{вх}) \gamma_0 + c_{вп} [(T_0 - T_c) x_0 - \right. \\ & \left. - (T_{вх} - T_c) x_{вх}] \right\} = \delta_п H_{оп} (\bar{T}_п - T_0) + (1 - \delta_п) \times \\ & \times (1 - \epsilon_{мо}) \frac{6}{d_q} \left\{ \sigma (\bar{x}_q^* - x_0) [c_{вп} (\bar{T}_q - T_c) + \gamma_0] - \right. \\ & \left. - h_q (T_0 - \bar{T}_q) \right\} + \rho_r \delta_п k_{оп} (\bar{x}_п - x_0) [c_{вп} (T_0 - T_c) - \\ & - \gamma_0] + a_{ст} h_{ст} (T_{ст} - T_0). \end{aligned} \quad (6.569)$$

Член $k_{оп}(\bar{x}_п - x_0)$ можно выразить из уравнения (6.543). Тогда последнее уравнение примет вид

$$\begin{aligned} & \frac{\rho_{гв} v_{мо}}{H_c} (c_{гв} + c_{вп} x_{вх}) (T_0 - T_{вх}) = \delta_{п} H_{оп} (\bar{T}_п - T) + \\ & + (1 - \delta_{п}) (1 - \epsilon_{мо}) \frac{6}{d_q} (\bar{T}_q - T_0) [c_{вп} \sigma (\bar{x}_q^* - x_0) + h_q] + \\ & + a_{ст} h_{ст} (T_{ст} - T_0), \end{aligned} \quad (6.570)$$

где коэффициент теплоотдачи от воздуха к стенке $h_{ст}$ может быть рассчитан с помощью эмпирического соотношения

$$\frac{h_{ст} d_q}{\lambda_{гв}} = 0,16 Re^{0,93}, \quad (6.571)$$

Запишем уравнение сохранения энергии для твердой частицы в случае нестационарных условий:

$$\rho_{тв} \frac{dI_q}{dt} = (1 + \frac{\rho_{тв}}{\rho_{в}} u_{кр}) \frac{6}{d_q} [q_k - \sigma (x_q^* - x_0) I_{вп}^*], \quad (6.572)$$

где

$$I_q = c_q (T_q - T_c) + x_q c_{вп} (T_q - T_c), \quad (6.573)$$

$$I_{вп}^* = \gamma_0 + c_{вп} (T_q - T_c). \quad (6.574)$$

$\rho_{тв}$ — плотность сухих твердых частиц; I_q — энтальпия частицы; $u_{кр}$ — критическое влагосодержание частицы; q_k — поток теплоты внутри частицы; $I_{вп}^*$ — энтальпия паров воды у поверхности частицы.

Баланс энергии для неподвижной пленки, окружающей твердую частицу (рис. 6.31), дает

$$q_k + \sigma (x_q^* - x_0) I_{во} = h_q (T_0 - T_q) + \sigma (x_q^* - x_0) I_{вп}^*, \quad (6.575)$$

или

$$q_k - \sigma (x_q^* - x_0) I_{вп}^* = h_q (T_0 - T_q) - \sigma (x_q^* - x_0) I_{во}. \quad (6.576)$$

Подставляя выражения (6.573), (6.576), (6.554) в уравнение (6.572), после приведения подобных членов получаем

$$\begin{aligned} & \rho_{тв} [(c_q + x_q c_{вп}) \frac{dT_q}{dt} + c_{вп} (T_q - T_c) \frac{du}{dt}] = \\ & = (1 + \frac{\rho_{тв}}{\rho_{в}} u_{кр}) \frac{6}{d_q} \left\{ h_q (T_0 - T_q) - \sigma (x_q^* - x_0) \times \right. \\ & \left. \lambda [c_{вп} (T_0 - T_c) + \gamma_0] \right\} \end{aligned} \quad (6.577)$$

или с учетом уравнения (6.549)

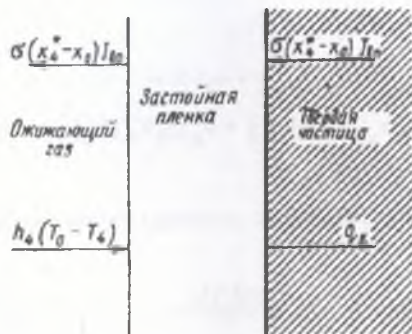


Рис. 6.31. Схема тепловых потоков относительно застойной пленки, окружающей твердую частицу

$$\rho_{\text{ТВ}}(c_{\text{ч}} + \mu c_{\text{в}}) \frac{dT_{\text{ч}}}{dt} = \left(1 + \frac{\rho_{\text{ТВ}}}{\rho_{\text{в}}} \mu_{\text{кр}}\right) \frac{6}{d_{\text{ч}}} \left\{ h_{\text{ч}}(T_0 - T_{\text{ч}}) - \sigma(x_{\text{ч}}^* - x_{\text{вых}}) [c_{\text{вп}}(T_0 - T_{\text{с}}) - c_{\text{в}}(T_{\text{ч}} - T_{\text{с}}) + \gamma_0] \right\}. \quad (6.578)$$

Теплота испарения γ_0 в уравнениях (6.577), (6.578) оценивается при температуре стандартного состояния $T_{\text{с}}$. Значение γ_0 при любой другой температуре T может быть вычислено из соотношения

$$c_{\text{в}} T_{\text{с}} - c_{\text{вп}} T_{\text{с}} + \gamma_0|_{T_{\text{с}}} = c_{\text{в}} T - c_{\text{вп}} T + \gamma_0|_T. \quad (6.579)$$

Для удобства выбирают $T = 0^\circ\text{C}$. Тогда

$$c_{\text{в}} T_{\text{с}} - c_{\text{вп}} T_{\text{с}} + \gamma_0|_{T_{\text{с}}} = \gamma_0|_{T=0^\circ\text{C}}. \quad (6.580)$$

Таким образом, уравнение (6.578) примет вид

$$\rho_{\text{ТВ}}(c_{\text{ч}} + \mu c_{\text{в}}) \frac{dT_{\text{ч}}}{dt} = \left(1 + \frac{\rho_{\text{ТВ}}}{\rho_{\text{в}}} \mu_{\text{кр}}\right) \frac{6}{d_{\text{ч}}} [h_{\text{ч}}(T_0 - T_{\text{ч}}) - \sigma(x_{\text{ч}}^* - x_0)(c_{\text{вп}} T_0 - c_{\text{в}} T_{\text{ч}} + \gamma_0)], \quad (6.581)$$

а начальное условие — вид

$$T_{\text{ч}} = T_{\text{чн}} \text{ при } t = 0. \quad (6.582)$$

Средняя температура частиц $\bar{T}_{\text{ч}}$ находится по формуле

$$\bar{T}_{\text{ч}} = \int_0^\infty \frac{1}{t} \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) T_{\text{ч}} dt. \quad (6.583)$$

Влагосодержание $x_{\text{вых}}$ и температура $T_{\text{вых}}$ газа на выходе из сушилки рассчитываются из уравнений баланса по влаге и энергетического баланса:

$$\nu_{\text{вх}} x_{\text{вых}} = \nu_{\text{мо}} x_0 + \nu_{\text{п}} x_{\text{п}}(H_c), \quad (6.584)$$

$$\begin{aligned} & \nu_{\text{вх}} [c_{\text{г}} T_{\text{вых}} + x_{\text{вых}} (c_{\text{вп}} T_{\text{вых}} + \gamma_0)] = \\ & = \nu_{\text{мо}} [c_{\text{г}} T_0 + x_0 (c_{\text{вп}} T_0 + \gamma_0)] + \nu_{\text{п}} [c_{\text{г}} T_{\text{п}}(H_c) + \\ & + x_{\text{п}}(H_c) (c_{\text{вп}} T_{\text{п}}(H_c) + \gamma_0)]. \end{aligned} \quad (6.585)$$

Выражая из последних уравнений искомые величины $x_{\text{вых}}$ и $T_{\text{вых}}$, получаем

$$x_{\text{вых}} = \frac{1}{\nu_{\text{вх}}} [\nu_{\text{мо}} x_0 + \nu_{\text{п}} x_{\text{п}}(H_c)]. \quad (6.586)$$

$$\begin{aligned} T_{\text{вых}} = \frac{1}{\nu_{\text{вх}} (c_{\text{г}} + x_{\text{вых}} c_{\text{вп}})} & \left\{ \nu_{\text{мо}} [c_{\text{г}} T_0 + x_0 (c_{\text{вп}} T_0 + \gamma_0)] + \right. \\ & \left. + \nu_{\text{п}} [c_{\text{г}} T_{\text{п}}(H_c) + x_{\text{п}}(H_c) (c_{\text{вп}} T_{\text{п}}(H_c) + \gamma_0)] - \nu_{\text{вх}} x_{\text{вых}} \gamma_0 \right\}. \end{aligned} \quad (6.587)$$

Уравнения (6.531), (6.543), (6.549), (6.566), (6.570), (6.581) с соответствующими начальными и граничными условиями составляют математическую модель процесса сушки в аппарате с псевдоожиженным слоем. Уравнения математической модели представляют собой нелинейную интегродифференциальную систему уравнений. Поэтому для ее решения необходимо использовать численные итерационные методы. Для упрощения этой системы и сведения ее к системе обыкновенных дифференциальных уравнений введем три новые промежуточные переменные x'_q , T'_q и $T'_п$. Положим

$$x'_q = \frac{1}{t} \int_0^t x_q^* \exp\left(-\frac{t}{t}\right) dt, \quad (6.588)$$

откуда получим дифференциальное уравнение

$$\frac{dx'_q}{dt} = \frac{x_q^*}{t} \exp\left(-\frac{t}{t}\right) \quad (6.589)$$

с граничным условием

$$x'_q = 0 \quad \text{при} \quad t = 0. \quad (6.590)$$

Аналогично, полагая

$$T'_q = \frac{1}{t} \int_0^t T_q \exp\left(-\frac{t}{t}\right) dt, \quad (6.591)$$

получим уравнение

$$\frac{dT'_q}{dt} = \frac{T_q}{t} \exp\left(-\frac{t}{t}\right) \quad (6.592)$$

с начальным условием

$$T'_q = 0 \quad \text{при} \quad t = 0, \quad (6.593)$$

а полагая

$$T'_n = \frac{1}{H_c} \int_0^z T_n dz \quad (6.594)$$

— уравнение

$$\frac{dT'_n}{dz} = \frac{T_n}{H_c} \quad (6.595)$$

с граничным условием

$$T'_n = 0 \text{ при } z = 0. \quad (6.596)$$

Тогда переменные $\bar{x}_q^*$, $\bar{T}_q$, $\bar{T}_n$ могут быть выражены так:

$$\bar{x}_q^* = \lim_{t \rightarrow \infty} x_q', \quad (6.597)$$

$$\bar{T}_q = \lim_{t \rightarrow \infty} T_q^*, \quad (6.598)$$

$$\bar{T}_n = T'_n|_{z=H_c}. \quad (6.599)$$

Если время пребывания t превышает некоторую заданную величину t^0 , то x_q^* и T_q в уравнениях (6.588), (6.591) останутся постоянными. В этом случае имеем

$$\begin{aligned} \bar{x}_q^* &= \frac{1}{t} \int_0^\infty x_q^* \exp\left(-\frac{t}{t}\right) dt = \frac{1}{t} \int_0^{t^0} x_q^* \exp\left(-\frac{t}{t}\right) dt + \\ &+ \frac{1}{t} \int_{t^0}^\infty x_q^* \exp\left(-\frac{t}{t}\right) dt = x_q'|_{t=t^0} + x_q^*|_{t=t^0} \exp\left(-\frac{t^0}{t}\right). \end{aligned} \quad (6.600)$$

Аналогично получаем

$$\bar{T}_q = T_q'|_{t=t^0} + T_q|_{t=t^0} \exp\left(-\frac{t^0}{t}\right). \quad (6.601)$$

Таким образом, необходимо решить систему алгебраических и обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка. Алгоритм расчета состоит в следующем.

1. Задают исходные данные.
2. Задают начальные значения x_0^* и T_0^* .
3. Выбирают величины t^0 ($\frac{t^0}{3} < t^0 < 2t^0$).
4. Рассчитывают величины $x_q'|_{t=t^0}$, $T_q'|_{t=t^0}$ и $T'_n|_{z=H_c}$ по уравнениям (6.589), (6.592), (6.595) при соответствующих граничных условиях с помощью метода Рунге—Кутты.
5. Рассчитывают величины $\bar{x}_q^*$, $\bar{T}_q$ и $\bar{T}_n$ по уравнениям (6.600), (6.601), (6.599).
6. Оценивают x_0 и T_0 из уравнений (6.543), (6.570).
7. Проверяют выполнение условий на окончании:

$$\nu_{\text{вх}} x_{\text{вых}} = \nu_{\text{мо}} x_0 + \nu_{\text{п}} x_{\text{п}}(H_c), \quad (6.584)$$

$$\begin{aligned} & \nu_{\text{вх}} [c_{\text{г}} T_{\text{вых}} + x_{\text{вых}} (c_{\text{вп}} T_{\text{вых}} + \gamma_0)] = \\ & = \nu_{\text{мо}} [c_{\text{г}} T_0 + x_0 (c_{\text{вп}} T_0 + \gamma_0)] + \nu_{\text{п}} [c_{\text{г}} T_{\text{п}}(H_c) + \\ & + x_{\text{п}}(H_c) (c_{\text{вп}} T_{\text{п}}(H_c) + \gamma_0)]. \end{aligned} \quad (6.585)$$

Выражая из последних уравнений искомые величины $x_{\text{вых}}$ и $T_{\text{вых}}$, получаем

$$x_{\text{вых}} = \frac{1}{\nu_{\text{вх}}} [\nu_{\text{мо}} x_0 + \nu_{\text{п}} x_{\text{п}}(H_c)]. \quad (6.586)$$

$$\begin{aligned} T_{\text{вых}} = \frac{1}{\nu_{\text{вх}} (c_{\text{г}} + x_{\text{вых}} c_{\text{вп}})} & \left\{ \nu_{\text{мо}} [c_{\text{г}} T_0 + x_0 (c_{\text{вп}} T_0 + \gamma_0)] + \right. \\ & \left. + \nu_{\text{п}} [c_{\text{г}} T_{\text{п}}(H_c) + x_{\text{п}}(H_c) (c_{\text{вп}} T_{\text{п}}(H_c) + \gamma_0)] - \nu_{\text{вх}} x_{\text{вых}} \gamma_0 \right\}. \end{aligned} \quad (6.587)$$

Уравнения (6.531), (6.543), (6.549), (6.566), (6.570), (6.581) с соответствующими начальными и граничными условиями составляют математическую модель процесса сушки в аппарате с псевдоожженным слоем. Уравнения математической модели представляют собой нелинейную интегродифференциальную систему уравнений. Поэтому для ее решения необходимо использовать численные итерационные методы. Для упрощения этой системы и сведения ее к системе обыкновенных дифференциальных уравнений введем три новые промежуточные переменные x'_q , T'_q и $T'_{\text{п}}$. Положим

$$x'_q = \frac{1}{t} \int_0^t x_q^* \exp\left(-\frac{t}{t}\right) dt, \quad (6.588)$$

откуда получим дифференциальное уравнение

$$\frac{dx'_q}{dt} = \frac{x_q^*}{t} \exp\left(-\frac{t}{t}\right) \quad (6.589)$$

с граничным условием

$$x'_q = 0 \quad \text{при} \quad t = 0. \quad (6.590)$$

Аналогично, полагая

$$T'_q = \frac{1}{t} \int_0^t T_q \exp\left(-\frac{t}{t}\right) dt, \quad (6.591)$$

получим уравнение

$$\frac{dT'_q}{dt} = \frac{T_q}{t} \exp\left(-\frac{t}{t}\right) \quad (6.592)$$

с начальным условием

$$T'_q = 0 \quad \text{при} \quad t = 0, \quad (6.593)$$

а полагая

$$T'_n = \frac{1}{H_c} \int_0^z T_n dz \quad (6.594)$$

— уравнение

$$\frac{dT'_n}{dz} = \frac{T_n}{H_c} \quad (6.595)$$

с граничным условием

$$T'_n = 0 \text{ при } z = 0. \quad (6.596)$$

Тогда переменные $\bar{x}_q^*$, $\bar{T}_q$, $\bar{T}_n$ могут быть выражены так:

$$\bar{x}_q^* = \lim_{t \rightarrow \infty} x_q', \quad (6.597)$$

$$\bar{T}_q = \lim_{t \rightarrow \infty} T_q^*, \quad (6.598)$$

$$\bar{T}_n = T'_n|_{z=H_c}. \quad (6.599)$$

Если время пребывания t превышает некоторую заданную величину t^0 , то x_q^* и T_q в уравнениях (6.588), (6.591) останутся постоянными. В этом случае имеем

$$\begin{aligned} \bar{x}_q^* &= \frac{1}{t} \int_0^\infty x_q^* \exp\left(-\frac{t}{t}\right) dt = \frac{1}{t} \int_0^{t^0} x_q^* \exp\left(-\frac{t}{t}\right) dt + \\ &+ \frac{1}{t} \int_{t^0}^\infty x_q^* \exp\left(-\frac{t}{t}\right) dt = x_q'|_{t=t^0} + x_q^*|_{t=t^0} \exp\left(-\frac{t^0}{t}\right). \end{aligned} \quad (6.600)$$

Аналогично получаем

$$\bar{T}_q = T_q'|_{t=t^0} + T_q|_{t=t^0} \exp\left(-\frac{t^0}{t}\right). \quad (6.601)$$

Таким образом, необходимо решить систему алгебраических и обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка. Алгоритм расчета состоит в следующем.

1. Задают исходные данные.
2. Задают начальные значения x_0^* и T_0^* .
3. Выбирают величины t^0 ($\frac{t^0}{3} < t^0 < 2t^0$).
4. Рассчитывают величины $x_q'|_{t=t^0}$, $T_q'|_{t=t^0}$ и $T'_n|_{z=H_c}$ по уравнениям (6.589), (6.592), (6.595) при соответствующих граничных условиях с помощью метода Рунге—Кутты.
5. Рассчитывают величины $\bar{x}_q^*$, $\bar{T}_q$ и $\bar{T}_n$ по уравнениям (6.600), (6.601), (6.599).
6. Оценивают x_0 и T_0 из уравнений (6.543), (6.570).
7. Проверяют выполнение условий на окончании:

$$\nu_{\text{вх}} x_{\text{вых}} = \nu_{\text{мо}} x_0 + \nu_{\text{п}} x_{\text{п}}(H_c), \quad (6.584)$$

$$\begin{aligned} & \nu_{\text{вх}} [c_{\text{г}} T_{\text{вых}} + x_{\text{вых}} (c_{\text{вп}} T_{\text{вых}} + \gamma_0)] = \\ & = \nu_{\text{мо}} [c_{\text{г}} T_0 + x_0 (c_{\text{вп}} T_0 + \gamma_0)] + \nu_{\text{п}} [c_{\text{г}} T_{\text{п}}(H_c) + \\ & + x_{\text{п}}(H_c) (c_{\text{вп}} T_{\text{п}}(H_c) + \gamma_0)]. \end{aligned} \quad (6.585)$$

Выражая из последних уравнений искомые величины $x_{\text{вых}}$ и $T_{\text{вых}}$, получаем

$$x_{\text{вых}} = \frac{1}{\nu_{\text{вх}}} [\nu_{\text{мо}} x_0 + \nu_{\text{п}} x_{\text{п}}(H_c)]. \quad (6.586)$$

$$\begin{aligned} T_{\text{вых}} = \frac{1}{\nu_{\text{вх}} (c_{\text{г}} + x_{\text{вых}} c_{\text{вп}})} & \left\{ \nu_{\text{мо}} [c_{\text{г}} T_0 + x_0 (c_{\text{вп}} T_0 + \gamma_0)] + \right. \\ & \left. + \nu_{\text{п}} [c_{\text{г}} T_{\text{п}}(H_c) + x_{\text{п}}(H_c) (c_{\text{вп}} T_{\text{п}}(H_c) + \gamma_0)] - \nu_{\text{вх}} x_{\text{вых}} \gamma_0 \right\}. \end{aligned} \quad (6.587)$$

Уравнения (6.531), (6.543), (6.549), (6.566), (6.570), (6.581) с соответствующими начальными и граничными условиями составляют математическую модель процесса сушки в аппарате с псевдоожиженным слоем. Уравнения математической модели представляют собой нелинейную интегродифференциальную систему уравнений. Поэтому для ее решения необходимо использовать численные итерационные методы. Для упрощения этой системы и сведения ее к системе обыкновенных дифференциальных уравнений введем три новые промежуточные переменные x'_q , T'_q и $T'_п$. Положим

$$x'_q = \frac{1}{t} \int_0^t x_q^* \exp\left(-\frac{t}{t}\right) dt, \quad (6.588)$$

откуда получим дифференциальное уравнение

$$\frac{dx'_q}{dt} = \frac{x_q^*}{t} \exp\left(-\frac{t}{t}\right) \quad (6.589)$$

с граничным условием

$$x'_q = 0 \quad \text{при} \quad t = 0. \quad (6.590)$$

Аналогично, полагая

$$T'_q = \frac{1}{t} \int_0^t T_q \exp\left(-\frac{t}{t}\right) dt, \quad (6.591)$$

получим уравнение

$$\frac{dT'_q}{dt} = \frac{T_q}{t} \exp\left(-\frac{t}{t}\right) \quad (6.592)$$

с начальным условием

$$T'_q = 0 \quad \text{при} \quad t = 0, \quad (6.593)$$

а полагая

$$T'_n = \frac{1}{H_c} \int_0^z T_n dz \quad (6.594)$$

— уравнение

$$\frac{dT'_n}{dz} = \frac{T_n}{H_c} \quad (6.595)$$

с граничным условием

$$T'_n = 0 \text{ при } z = 0. \quad (6.596)$$

Тогда переменные $\bar{x}_q^*$, $\bar{T}_q$, $\bar{T}_n$ могут быть выражены так:

$$\bar{x}_q^* = \lim_{t \rightarrow \infty} x_q', \quad (6.597)$$

$$\bar{T}_q = \lim_{t \rightarrow \infty} T_q^*, \quad (6.598)$$

$$\bar{T}_n = T'_n|_{z=H_c}. \quad (6.599)$$

Если время пребывания t превышает некоторую заданную величину t^0 , то x_q^* и T_q в уравнениях (6.588), (6.591) останутся постоянными. В этом случае имеем

$$\begin{aligned} \bar{x}_q^* &= \frac{1}{t} \int_0^\infty x_q^* \exp\left(-\frac{t}{t}\right) dt = \frac{1}{t} \int_0^{t^0} x_q^* \exp\left(-\frac{t}{t}\right) dt + \\ &+ \frac{1}{t} \int_{t^0}^\infty x_q^* \exp\left(-\frac{t}{t}\right) dt = x_q'|_{t=t^0} + x_q^*|_{t=t^0} \exp\left(-\frac{t^0}{t}\right). \end{aligned} \quad (6.600)$$

Аналогично получаем

$$\bar{T}_q = T_q'|_{t=t^0} + T_q|_{t=t^0} \exp\left(-\frac{t^0}{t}\right). \quad (6.601)$$

Таким образом, необходимо решить систему алгебраических и обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка. Алгоритм расчета состоит в следующем.

1. Задают исходные данные.
2. Задают начальные значения x_0^n и T_0^n .
3. Выбирают величины t^0 ($\frac{t}{3} < t^0 < 2t$).
4. Рассчитывают величины $x_q'|_{t=t^0}$, $T_q'|_{t=t^0}$ и $T'_n|_{z=H_c}$ по уравнениям (6.589), (6.592), (6.595) при соответствующих граничных условиях с помощью метода Рунге—Кутты.
5. Рассчитывают величины $\bar{x}_q^*$, $\bar{T}_q$ и $\bar{T}_n$ по уравнениям (6.600), (6.601), (6.599).
6. Оценивают x_0 и T_0 из уравнений (6.543), (6.570).
7. Проверяют выполнение условий на окончании:

$$|x_0^n - x_0| < 10^{-4}, |T_0^n - T_0| < 10^{-2}.$$

Если эти условия выполнены, то расчет оканчивают. В противном случае переходят к п. 2.

§ 6.9. Массовая кристаллизация из растворов

Кристаллизацией называется процесс выделения твердой фазы в виде кристаллов из растворов и расплавов.

В химической технологии процессы кристаллизации широко используются для получения в чистом виде различных веществ. Осуществляемое в промышленном масштабе одновременное получение большого числа кристаллов носит название *массовой кристаллизации*.

Массовую кристаллизацию обычно проводят из водных растворов, понижая растворимость кристаллизующего вещества вследствие изменения температуры раствора или удаления части растворителя.

Равновесие между твердой и жидкой фазой. Раствор, находящийся в равновесии с твердой фазой при данной температуре, называется *насыщенным*. В насыщенных растворах между кристаллами и жидкой фазой устанавливается подвижное равновесие (количество ионов либо молекул, переходящих в жидкую фазу с поверхности кристалла, равно количеству вновь встраиваемых в кристалл ионов либо молекул за одинаковый интервал времени). Однако при определенных условиях концентрация растворенного вещества может быть больше соответствующей равновесной концентрации при данной температуре. Такие растворы называются *пересыщенными*. Они нестабильны и легко переходят в состояние насыщения с выделением части твердой фазы.

На основе диаграмм состояния растворов можно выяснить поведение раствора при его кристаллизации и получить данные для выбора наиболее рационального способа проведения процесса кристаллизации. На рис. 6.32 изображены диаграммы состояний трех бинарных систем. В каждой

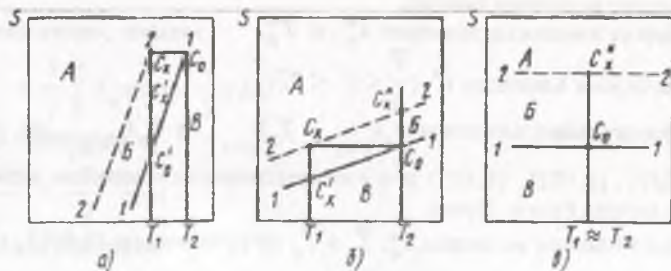


Рис. 6.32. Диаграммы состояний растворимость (S) – температура (T) бинарных систем: а – KNO_3 ; б – KCl ; в – NaCl

системе ниже линии 1-1 (линии растворимости) находится область ненасыщенных растворов (область В). Пунктирная линия 2-2 условно делит область пересыщенных растворов на две части. Между линиями 1-1 и 2-2 расположена относительно устойчивая или метастабильная область Б и над линией 2-2 — неустойчивая или лабильная область А.

Пересыщенные растворы с концентрациями, соответствующими лабильной области, быстро кристаллизуются, в метастабильной же области эти растворы то или иное время остаются без изменения.

Границы метастабильной области зависят от большого числа факторов: температуры раствора, скорости его охлаждения или испарения, перемешивания и т.д. Так, из соединений с резко возрастающей кривой растворимости (рис. 6.32, а) при относительно большом снижении температуры насыщенного раствора от T_2 до T_1 состояние раствора сначала отвечает метастабильной области (участок от C_0 до C_x), а затем — области пересыщенных растворов, где происходит выделение твердой фазы. При этом раствор снова становится насыщенным и его концентрация значительно уменьшается (от C_0 до C'_0).

Кристаллизацию таких растворов, близких к насыщению, целесообразно вести путем их охлаждения, осуществляя быстрый переход в благоприятную для кристаллизации метастабильную область.

Для веществ, растворимость которых медленно возрастает с ростом температуры (рис. 6.32, б), переход в область пересыщения (от C_0 до C_x) происходит лишь при значительном снижении температуры. При этом количество выпавшей из раствора твердой фазы невелико. Из рис. 6.32, б видно, что состояние пересыщения может быть достигнуто и при постоянной температуре путем удаления части растворителя. Для таких растворов вопрос о выборе оптимального способа кристаллизации решается технико-экономическим расчетом.

Наконец, на рис. 6.32, в рассмотрен случай, когда растворимость кристаллизующего вещества почти не изменяется при изменении температуры. Для таких веществ целесообразно проводить кристаллизацию путем выпаривания.

Кинетика процесса кристаллизации. Скорость кристаллизации определяется рядом факторов, среди которых степень пересыщения раствора, температура, интенсивность перемешивания, наличие поверхностей, примеси и др. Указанные факторы влияют на механизм протекания процесса. Сложность учета влияния различных факторов заключается в том, что процесс возникновения кристаллических зародышей и рост из них кристаллов протекают одновременно.

Образование зародышей в пересыщенных растворах происходит самопроизвольно. Зародыши возникают благодаря созданию ассоциаций при столкновении молекул в растворе. Они находятся в подвижном равновесии с раствором и видимой кристаллизации не происходит. Этот период называют *индукционным*.

В зависимости от природы растворенного вещества и растворителя, степени пересыщения и наличия примесей продолжительность индукцион-

ного периода может сильно различаться. Его можно сократить путем внесения в пересыщенный раствор кристалликов растворенного вещества — затравки. Начало массовой кристаллизации соответствует моменту нарушения устойчивого подвижного равновесия в растворе.

Скорость образования зародышей может увеличиваться путем повышения температуры, увеличения перемешивания, внешних механических воздействий (встряхивание, трение). Большое влияние на образование зародышей оказывает шероховатость стенок кристаллизатора, материал мешалки.

Соотношения, количественно описывающие скорость образования зародышей, носят, как правило, эмпирический характер и отражают тот или иной механизм процесса.

Согласно механизму гомогенного зародышеобразования скорость процесса I определяется величиной пересыщения раствора и имеет вид

$$I = K \Delta C^m, \quad (6.602)$$

где ΔC — пересыщение раствора; K и m — константы, зависящие от физико-химических свойств растворенного вещества и растворителя.

В системах с малым пересыщением важное место занимает вторичное зародышеобразование. Оно происходит вследствие столкновения кристаллов друг с другом либо с поверхностями стенок аппарата, мешалки. Установлена сильная зависимость скорости вторичного зародышеобразования от пересыщения. Для количественного описания скорости вторичного зародышеобразования можно использовать соотношение

$$I = K \Delta C^{m_1} M_{кр}^{m_2}, \quad (6.603)$$

где $M_{кр}$ — масса твердой фазы.

Рост кристаллов происходит на сформировавшихся и достигших критической величины зародышах. Кристаллы обладают большой поверхностной энергией, за счет которой происходит встраивание в кристаллическую решетку новых ионов либо молекул растворенного вещества.

Скорость кристаллизации не является постоянной, а меняется во времени в зависимости от условий кристаллизации. Сначала скорость равна нулю (период индукции), затем достигает максимума и снова уменьшается.

На рис. 6.33 изображена зависимость скорости кристаллизации от времени для различной степени пересыщения раствора.

При большой степени пересыщения раствора (кривая 1 на рис. 6.33) наблюдается резкий максимум скорости процесса.

При малой степени пересыщения или тормозящих кристаллизацию примесей на кривой скорости кристаллизации наблюдается пологий максимум (он соответствует интервалу времени от t_1 до t_3).

Повышение температуры кристаллизации оказывает положительное влияние на скорость роста кристаллов (при увеличении температуры уменьшается вязкость среды и облегчается диффузия). Однако рост температуры

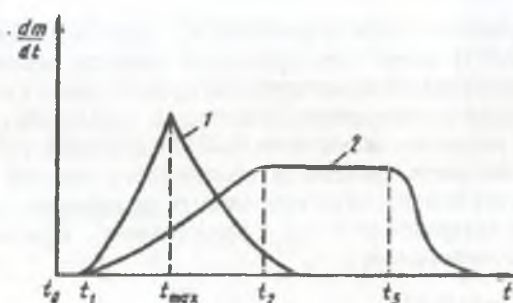


Рис. 6.33. Зависимость скорости кристаллизации от времени: 1 — при больших степенях пересыщения; 2 — при малых степенях пересыщения

сильнее сказывается на числе зародышей, что приводит к образованию мелких кристаллов.

Процесс, в результате которого растворенное вещество оказывается выделившимся на поверхности растущего кристалла, обычно протекает в два этапа.

Первый этап — перенос растворенного вещества к поверхности кристалла — записывается в виде уравнения массоотдачи

$$\frac{dm}{dt} = \beta F_s (C - C_r), \quad (6.604)$$

где β — коэффициент массоотдачи; m — масса кристалла; F_s — поверхность кристалла; C , C_r — концентрация кристаллизующегося вещества в основной массе раствора и у поверхности кристалла.

Второй этап — встраивание в кристаллическую решетку — определяется соотношением

$$\frac{dm}{dt} = \beta_{кр} F_s (C_r - C^*)^n, \quad (6.605)$$

где $\beta_{кр}$ — коэффициент кристаллизации, зависящий от температуры; C^* — равновесная концентрация раствора.

Из уравнений (6.604), (6.605) можно определить C_r , а затем, подставив C_r в уравнение (6.604), определить скорость роста кристалла. Если $n = 1$ (реакция первого порядка), то

$$\frac{dm}{dt} = \rho_{тв}^0 \eta = \frac{1}{\frac{1}{\beta} + \frac{1}{\beta_{кр}}} F_s (C - C^*), \quad (6.606)$$

где $\rho_{тв}^0$ — плотность чистой кристаллической фазы; η — объемная скорость роста кристалла.

Если скорость процесса встраивания в кристаллическую решетку (уравнение (6.605)) значительно превышает скорость переноса вещества к поверхности кристалла, то лимитирующей процесс роста кристалла стадией является диффузия растворенного вещества к поверхности кристалла и процесс роста кристаллов может быть описан с помощью уравнения (6.604).

Если процесс роста кристаллов лимитируется стадией встраивания в кристаллическую решетку, то он описывается уравнением (6.605). При этом n лежит в интервале от 1 до 2, а коэффициент кристаллизации $\beta_{кр}$ определяется соотношением

$$\beta_{кр} = aL^b \exp(E/RT), \quad (6.607)$$

где L — размер кристалла; E — энергия активации роста кристалла; T — температура; a и b — эмпирические константы.

Оценка кинетических параметров зародышеобразования и скорости роста кристаллов. Рассмотрим два механизма скорости роста кристаллов.

Для первого механизма рост кристалла происходит в диффузионной области. Изменение массы кристалла во времени описывается соотношением

$$\frac{dm}{dt} = \rho_{ТВ}^0 \eta = \beta F_s \Delta C, \quad (6.608)$$

где $\Delta C = (C - C^*)$ — пересыщение раствора.

Коэффициент массоотдачи β в аппаратах с мешалками определяется по формуле

$$\beta = \left(\frac{ED^a}{\nu a^2} \right)^{1/6}, \quad (6.609)$$

где D — коэффициент диффузии; ν — вязкость; E — удельная мощность на перемешивание $E = k\rho_{ж}n^3d^5$; n — число оборотов мешалки; d — диаметр мешалки; $\rho_{ж}$ — плотность раствора; a — характеристический размер кристаллов; k — константа.

Учитывая соотношение (6.609), найдем скорость роста кристаллов η для диффузионного механизма:

$$\eta(\nu) = \frac{1}{\rho_{ТВ}^0} \left\{ \frac{k\rho_{ж}n^3d^5D^a}{\nu a^2} \right\}^{1/6} F_s \Delta C, \quad (6.610)$$

где ν — объем кристалла; $\rho_{ТВ}^0$ — плотность кристаллической фазы.

Рост кристаллов для второго механизма определяется скоростью встраивания ионов либо молекул в кристаллическую решетку. Скорость роста η в этом случае выражается формулой

$$\eta(\nu) = \frac{1}{\rho_{ТВ}^0} \beta_{кр} F_s (C - C^*)^n, \quad (6.611)$$

где $\beta_{кр}$ и n — параметры скорости роста кристаллов.

Подставив соотношения (6.610) и (6.611) в уравнение сохранения

массы вещества в растворе в периодическом кристаллизаторе с мешалкой, имеющее вид

$$\frac{dC}{dt} = -M \int_0^{\nu_M} \rho_{\text{ТВ}}^0 p(\nu) \eta(\nu) d\nu, \quad (6.612)$$

получим:

для первого механизма

$$\frac{dC}{dt} = -kM \left[\int_0^{\nu_M} p(\nu) \left(\frac{\rho_{\text{ж}} n^3 d^5 D^4}{\nu a^2} \right)^{1/6} F_s d\nu \right] (C - C^*), \quad (6.613)$$

для второго механизма

$$\frac{dC}{dt} = -M\beta_{\text{кр}} (C - C^*) \int_0^{\nu_M} p(\nu) F_s d\nu. \quad (6.614)$$

Здесь M — отношение молекулярного веса безводной соли к кристаллогидрату; ν_M — максимальный объем кристаллов.

Зная экспериментальные значения $\frac{dC}{dt}$, $p(t, \nu)$, $T(t)$, на основании уравнений (6.613), (6.614) можно найти искомые параметры k , $\beta_{\text{кр}}$, n .

После определения параметров проводят дискриминацию моделей, выбрав механизм роста по наилучшему совпадению с экспериментом.

Для оценки параметров скорости зародышеобразования используют экспериментальные данные по периодической кристаллизации в кристаллизаторе с мешалкой. Уравнение сохранения массы кристаллов объемом ν имеет вид

$$\frac{\partial p(t, \nu)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \nu} (p(t, \nu) \eta) = 0, \quad (6.615)$$

где $p(t, \nu)$ — функция плотности распределения кристаллов по объему в момент времени t .

Проинтегрируем уравнение (6.615) от размера зародышей ν_3 до максимального размера кристаллов в системе ν_M :

$$\frac{d}{dt} \int_{\nu_3}^{\nu_M} p(t, \nu) d\nu + p(t, \nu) \eta \Big|_{\nu=\nu_M} - p(t, \nu) \eta \Big|_{\nu=\nu_3} = 0. \quad (6.616)$$

Так как $\lim_{\nu \rightarrow \nu_M} p(t, \nu) = 0$ и $p(t, \nu_3) \eta = I$, то уравнение (6.616) приводится к виду

$$\frac{d}{dt} \mu_0 = I, \quad (6.617)$$

где $\mu_0 = \int_{\nu_3}^{\nu_M} p(t, \nu) d\nu$ — нулевой момент плотности распределения, характеризующий общее число кристаллов в единице объема;

I — скорость зародышеобразования.

Рассмотрим три механизма зародышеобразования.

Первый механизм характеризуется гомогенным зародышеобразованием, скорость которого зависит только от величины пересыщения, т.е.

$$I = k_1 \Delta C^{n_1}. \quad (6.618)$$

Второй механизм характеризуется вторичным зародышеобразованием, скорость которого зависит от числа столкновений, т.е.

$$I = k_2 \mu_0^{n_2}. \quad (6.619)$$

Третий механизм характеризуется вторичным зародышеобразованием, при котором скорость зависит от истирания кристаллов, т.е.

$$I = k_3 E^{n_3} \mu_0. \quad (6.620)$$

После подстановки выражений (6.618)–(6.620) в уравнение (6.617) получаем:

для первого механизма

$$\frac{d\mu_0}{dt} = k_1 \Delta C^{n_1}; \quad (6.621)$$

для второго механизма

$$\frac{d\mu_0}{dt} = k_2 \mu_0^{n_2}; \quad (6.622)$$

для третьего механизма

$$\frac{d\mu_0}{dt} = k_3 E^{n_3} \mu_0. \quad (6.623)$$

Далее по экспериментальным значениям $\frac{d\mu_0}{dt}(t)$, $\mu_0(t)$, $C(t)$, $E(t)$, $T(t)$ с помощью уравнений (6.621)–(6.623) определяют параметры k_1 , k_2 , k_3 , n_1 , n_2 , n_3 . После оценки параметров проводят дискриминацию моделей.

Описание кристаллизации методами механики сплошных сред. Процесс кристаллизации протекает в гетерогенных смесях, включающих жидкую и твердую (кристаллическую) фазы. Характерной особенностью твердой фазы является различие присутствующих кристаллов по размерам. Описание движения такой смеси методами механики сплошных сред возможно при выполнении следующих условий: 1) расстояния, на которых параметры течения существенно изменяются, намного больше размеров кристаллов и расстояний между ними; 2) присутствующие в смеси кристаллы достаточно многочисленны, так что распределение кристаллов по размерам можно считать непрерывным.

Распределение кристаллической фазы по размерам (объему v) определим с помощью функции плотности распределения $p(v)$. Тогда величина $p(v)dv$ выражает число частиц в единице объема смеси, объемы которых заключены в интервале от v до $v + dv$.

Обозначим максимальный объем кристаллов, присутствующих в смеси, через v_M . Очевидны следующие соотношения:

$$\lim_{\nu \rightarrow 0} p(\nu) = \lim_{\nu \rightarrow \nu_M} p(\nu) = 0. \quad (6.624)$$

В силу сделанных допущений совокупность кристаллов объемом ν будем рассматривать как некую сплошную фазу, присутствующую в каждой точке смеси, и называть его фазой кристаллов объемом ν . Так как функция плотности распределения кристаллов по объемам $p(\nu)$ непрерывна, то в смеси можно выделить бесконечное число фаз кристаллов различного объема, причем все присутствующие фазы заполняют одновременно один и тот же объем.

Каждая из выделенных сплошных фаз, а также жидкая фаза характеризуется в любой точке гетерогенной смеси своими параметрами состояния: плотностью, давлением, вектором скорости и температурой.

Введем объемное содержание в смеси жидкой фазы $a_{\text{ж}}$ и совокупности кристаллических фаз $a_{\text{ТВ}}$. При известной плотности распределения кристаллов по объемам $p(\nu)$ доля кристаллов $a_{\text{ТВ}}$ в единицу объема смеси определяется соотношением

$$a_{\text{ТВ}} = \int_0^{\nu_M} \nu p(\nu) d\nu. \quad (6.625)$$

Очевидно, что

$$a_{\text{ж}} + a_{\text{ТВ}} = a_{\text{ж}} + \int_0^{\nu_M} \nu p(\nu) d\nu = 1. \quad (6.626)$$

Если обозначить плотность чистой жидкой фазы через $\rho_{\text{ж}}^0$, а плотность чистых кристаллов — через $\rho_{\text{ТВ}}^0$, то с учетом введенных объемных содержаний фаз плотности жидкой фазы $\rho_{\text{ж}}$ и твердой фазы $\rho_{\text{ТВ}}$ выразятся формулами

$$\rho_{\text{ж}} = \rho_{\text{ж}}^0 a_{\text{ж}}, \quad (6.627)$$

$$\rho_{\text{ТВ}} = \rho_{\text{ТВ}}^0 a_{\text{ТВ}}, \quad (6.628)$$

где индекс "ж" относится к жидкой фазе, а "ТВ" — ко всей кристаллической фазе.

Будем полагать в дальнейшем, что взаимодействия между кристаллами отсутствуют, а влияние фазы зародышей на перенос массы и энергии в смеси пренебрежимо мало.

С точки зрения механики сплошных сред каждая из выделенных нами фаз рассматривается как непрерывная. Тогда для каждой из фаз справедливы дифференциальные уравнения сохранения массы, импульса и энергии.

Запишем уравнения сохранения массы для фазы кристаллов объемом ν и жидкой фазы:

для фазы кристаллов объемом ν

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}_{\nu}) = - \frac{\partial}{\partial \nu} (\rho \eta), \quad (6.629)$$

для жидкой фазы

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{\text{ж}} + \operatorname{div}(\rho_{\text{ж}} \vec{u}_{\text{ж}}) = - \int_0^{\nu_{\text{м}}} \rho_{\text{тв}}^0 p \eta dv. \quad (6.630)$$

В ходе процесса кристаллизации уменьшение количества растворенной соли в растворе должно соответствовать количеству выделившихся кристаллов. Поэтому справедливо следующее уравнение сохранения массы соли в растворе:

$$\begin{aligned} \rho_{\text{ж}} \left[\frac{\partial C}{\partial t} + u_{\text{ж}}^x \frac{\partial C}{\partial x} + u_{\text{ж}}^y \frac{\partial C}{\partial y} + u_{\text{ж}}^z \frac{\partial C}{\partial z} \right] = \\ = (C - M) \int_0^{\nu_{\text{м}}} \rho_{\text{тв}}^0 p(v) \eta(v) dv. \end{aligned} \quad (6.631)$$

Здесь C — массовая концентрация соли в растворе; M — отношение молекулярных весов безводной соли к кристаллогидрату (если полученное вещество безводное, то $M = 1$); $u_{\text{ж}}$, $u_{\text{в}}$ — соответственно векторы скоростей жидкой фазы и фазы кристаллов объемом v .

Для каждой из фаз гетерогенной смеси в ходе кристаллизации должен выполняться закон сохранения количества движения. Следовательно, можно записать соответствующие уравнения движения.

Уравнение движения для фазы кристаллов объемом v имеет вид

$$\begin{aligned} \rho_{\text{тв}}^0 p v \left[\frac{\partial u_v}{\partial t} + u_v^x \frac{\partial u_v}{\partial x} + u_v^y \frac{\partial u_v}{\partial y} + u_v^z \frac{\partial u_v}{\partial z} + \eta \frac{\partial u_v}{\partial v} \right] = \\ = - p v \vec{\nabla} P + \rho_{\text{тв}}^0 p v f_{\text{ж}v} - \rho_{\text{тв}}^0 p v \vec{F}_v, \end{aligned} \quad (6.632)$$

где $\vec{F}_v$ — внешняя массовая сила, приходящаяся на фазу кристаллов объемом v ; $\rho_{\text{тв}}^0 p(v) v \vec{\nabla} P$ — архимедова сила.

Сила взаимодействия между жидкой фазой и кристаллами в первом приближении определяется силой трения между фазами $F_{\text{тр}}$, которая для кристаллов размером d без учета стесненности составляет

$$F_{\text{тр}} = C_d \frac{\pi d^2}{4} \frac{\rho_{\text{ж}}^0 (|\vec{u}_{\text{ж}} - \vec{u}_v|)^3}{2|\vec{u}_{\text{ж}} - \vec{u}_v|}. \quad (6.633)$$

Для жидкой фазы уравнение движения в условиях пренебрежимо малых вязких напряжений записывается в виде

$$\begin{aligned} \rho_{\text{ж}} \left[\frac{\partial u_{\text{ж}}}{\partial t} + u_{\text{ж}}^x \frac{\partial u_{\text{ж}}}{\partial x} + u_{\text{ж}}^y \frac{\partial u_{\text{ж}}}{\partial y} + u_{\text{ж}}^z \frac{\partial u_{\text{ж}}}{\partial z} \right] = \\ = - \alpha_{\text{ж}} \vec{\nabla} P - \int_0^{\nu_{\text{м}}} \rho_{\text{тв}}^0 p(v) v f_{\text{ж}v} dv - \\ - \int_0^{\nu_{\text{м}}} \rho_{\text{тв}}^0 p(v) \eta(v) (u_v - u_{\text{ж}}) dv + \rho_{\text{ж}} \vec{F}_{\text{ж}}. \end{aligned} \quad (6.634)$$

Здесь член $\int_0^{\nu_{\text{м}}} \rho_{\text{тв}}^0 p(v) \eta(v) (u_v - u_{\text{ж}}) dv$ определяет изменение количества

движения жидкой фазы за счет фазового перехода, а последний член $\rho_{\text{ж}} \vec{F}_{\text{ж}}$ — влияние внешней массовой силы.

Запишем теперь уравнения сохранения энергии. Сначала выделим в качестве составляющей энергии многофазной смеси поверхностную энергию F_{σ} . Тогда внутренняя энергия смеси с учетом присутствующих фаз составит

$$\rho E = \rho_{\text{ж}} E_{\text{ж}} + \int_0^{\nu_{\text{м}}} (\rho_{\text{тв}}^0 \rho \nu E_{\nu} + \rho f_{\sigma}^{\nu}) d\nu, \quad (6.635)$$

где E_{σ}^{ν} — поверхностная энергия сферической частицы объемом ν .

В дальнейшем при выводе уравнений энергии каждой фазы будем пренебрегать работой внутренних сил. В этом случае изменение внутренней энергии фазы будет определяться потоками теплоты, поступающими в фазу и покидающими ее. Для фазы кристаллов объемом ν поток теплоты, поступающий к фазе, выражается формулой

$$\rho_{\text{тв}}^0 \rho \nu Q_{\nu} = -\rho_{\text{тв}}^0 \rho \nu \eta \frac{\partial E_{\nu}}{\partial \nu} - q_{\nu\sigma}, \quad (6.636)$$

где первый член уравнения (6.636) определяет теплоту, получаемую фазой кристаллов объемом ν при переходе кристаллов из одной фазы в другую вследствие их роста, а второй член соответствует потоку теплоты от фазы кристаллов объемом ν к поверхности раздела фаз (не связанному с фазовым превращением). Так как внутренняя энергия E_{ν} изменяется во времени и в пространстве с координатами (x, y, z, ν) , то дифференциальное уравнение сохранения внутренней энергии для фазы кристаллов объемом ν запишется в виде

$$\rho_{\text{тв}}^0 \rho \nu \left[\frac{\partial E_{\nu}}{\partial t} + u_{\nu}^x \frac{\partial E_{\nu}}{\partial x} + u_{\nu}^y \frac{\partial E_{\nu}}{\partial y} + u_{\nu}^z \frac{\partial E_{\nu}}{\partial z} + \eta \frac{\partial E_{\nu}}{\partial \nu} \right] = q_{\nu\sigma}. \quad (6.637)$$

Поток теплоты $\rho_{\text{ж}} Q_{\text{ж}}$, поступающий к жидкой фазе, определяется потоком теплоты $q_{\text{ж}\sigma}$ от жидкой фазы к поверхности раздела фаз:

$$\rho_{\text{ж}} Q_{\text{ж}} = \int_0^{\nu_{\text{м}}} -q_{\text{ж}\sigma} d\nu. \quad (6.638)$$

Тогда дифференциальное уравнение сохранения внутренней энергии для жидкой фазы примет вид

$$\rho_{\text{ж}} \left[\frac{\partial E_{\text{ж}}}{\partial t} + u_{\text{ж}}^x \frac{\partial E_{\text{ж}}}{\partial x} + u_{\text{ж}}^y \frac{\partial E_{\text{ж}}}{\partial y} + u_{\text{ж}}^z \frac{\partial E_{\text{ж}}}{\partial z} \right] = \int_0^{\nu_{\text{м}}} -q_{\text{ж}\sigma} d\nu. \quad (6.639)$$

Наконец, поток теплоты, νQ_{σ} , поступающий к поверхности раздела фазы кристаллов объемом ν , составляет

$$\nu Q_{\sigma} = -\rho \eta \frac{\partial E_{\sigma}^{\nu}}{\partial \nu} - \rho_{\text{тв}}^0 \rho \eta (i_{\text{тв}} - i_{\text{ж}}) + q_{\text{ж}\sigma} + q_{\nu\sigma}, \quad (6.640)$$

где первый член уравнения отражает изменение поверхностной энергии кристаллов объемом ν вследствие их роста, а второй — поток теплоты бла-

годаря фазовому превращению (здесь $i_{\text{ж}}$, $i_{\text{тв}}$ — соответственно энтальпии жидкой фазы и фазы кристаллов).

Соответствующее уравнение сохранения внутренней энергии для поверхности раздела кристаллов объемом ν запишется в виде

$$\rho(\nu) \left[\frac{\partial E_{\sigma}^{\nu}}{\partial t} + u_{\nu}^x \frac{\partial E_{\sigma}^{\nu}}{\partial x} + u_{\nu}^y \frac{\partial E_{\sigma}^{\nu}}{\partial y} + u_{\nu}^z \frac{\partial E_{\sigma}^{\nu}}{\partial z} + \eta \frac{\partial E_{\sigma}^{\nu}}{\partial \nu} \right] = \\ = q_{\text{ж}\sigma}(\nu) + q_{\nu\sigma}(\nu) - \rho_{\text{тв}}^0 \rho(\nu) \eta (i_{\text{тв}} - i_{\text{ж}}). \quad (6.641)$$

Введем соответствующие температуры фаз $T_{\text{ж}}$, $T_{\nu}(\nu)$, $T_{\sigma}(\nu)$ и следующие уравнения состояния:

$$E_{\sigma}^{\nu} = c - T_{\sigma} \frac{d_{\sigma}}{dT_{\sigma}}, \quad (6.642)$$

$$i_{\text{ж}} = \frac{c}{M} \Delta h_s + \left(1 - \frac{c}{M}\right) i_{\text{в}} + \frac{c}{M} i_{\nu\text{ж}}, \quad (6.643)$$

$$i_{\text{тв}} = \Delta H_{\text{тв}(298)} + \int_{298}^{T_{\nu}} c_{\text{тв}} dT, \quad (6.644)$$

где $T_{\text{ж}}$, T_{ν} , $T_{\sigma}(\nu)$ — температуры жидкой фазы, фазы кристаллов объемом ν и поверхности раздела фаз соответственно; Δh_s — теплота растворения

при концентрации насыщения; $i_{\text{в}} = \Delta H_{\text{в}(298)} + \int_{298}^{T_{\text{ж}}} c_{\text{в}} dT$; $i_{\nu\text{ж}} = \Delta H_{\text{тв}(298)} + \int_{298}^{T_{\text{ж}}} c_{\text{тв}} dT$; $\Delta H_{\text{в}(298)}$, $\Delta H_{\text{тв}(298)}$ — стандартные энтальпии воды и твердого вещества соответственно; $c_{\text{в}}$, $c_{\text{тв}}$ — удельные теплоемкости воды и кристаллизуемого вещества (предполагается, что кристаллизация происходит в водном растворе).

Входящие в систему уравнений математического описания процесса кристаллизации параметры η и C^* таковы:

$$\eta = \frac{1}{\rho_{\text{тв}}^0 \left(\frac{1}{\beta} + \frac{1}{\beta_{\text{кр}}} \right)} F_s (C - C^*(\nu)) \quad \text{при } n = 1, \quad (6.645)$$

$$C^* = C^*(T_{\sigma}(\nu)). \quad (6.646)$$

Коэффициент массоотдачи β можно определить из эмпирического соотношения

$$\text{Nu} = A_1 \text{Re}_{\text{ж}\nu}^{n_1} \text{Pr}^{n_2}, \quad (6.647)$$

где

$$\text{Re}_{\text{ж}\nu} = \frac{|\vec{u}_{\text{ж}} - \vec{u}_{\nu}| d}{\nu_{\text{ж}}}; \quad \text{Pr} = \frac{\nu_{\text{ж}}}{D_{\text{ж}}}; \quad \text{Nu} = \frac{\beta d}{D_{\text{ж}}}; \quad (6.648)$$

$\nu_{\text{ж}}$ — вязкость раствора; $D_{\text{ж}}$ — коэффициент диффузии; d — диаметр частицы.

Система уравнений (6.626) – (6.634), (6.637), (6.639), (6.641) представляет собой общее математическое описание процесса кристаллизации, учитывающее распределение кристаллов по размерам, их рост и взаимодействие с жидкой фазой. На основе полученной системы уравнений возможно описание промышленных процессов кристаллизации. Далее рассмотрим наиболее распространенные промышленные способы проведения кристаллизации и исходя из общего описания приведем соответствующие модели кристаллизаторов.

Математическая модель периодического кристаллизатора с мешалкой. Структура потоков в аппаратах данного класса при интенсивном перемешивании может быть описана моделью идеального перемешивания. Тогда система уравнений (6.626) – (6.634), (6.637), (6.639), (6.641) преобразуется к виду

$$\begin{aligned}\frac{d\bar{C}}{dt} &= -M \int_0^{\nu_M} \rho_{TB}^0 \eta dv, \quad \bar{C} = \rho_{ж} C, \\ \frac{d\rho_{ж}}{dt} &= - \int_0^{\nu_M} \rho_{TB}^0 p \eta dv, \\ \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial(p\eta)}{\partial \nu} &= 0, \\ \left(\rho_{ж} c_{ж} + \int_0^{\nu_M} \rho_{TB}^0 p \nu dv c_{1n} \right) \frac{dT}{dt} &= \Delta h \int_0^{\nu_M} \rho_{TB}^0 p \eta dv + Q_{ж}.\end{aligned}\tag{6.649}$$

Член $Q_{ж}$, характеризующий отвод теплоты от кристаллизатора, охлаждаемого водой, составляет

$$Q_{ж} = -\beta_T F_{уд} (T - T_B),\tag{6.650}$$

где $F_{уд}$ – удельная поверхность теплопередачи; T_B – температура охлаждающей воды; β_T – коэффициент теплопередачи.

В системе уравнений (6.649) не учитывается масса зародышей в силу их малости. Однако зародышеобразование можно учесть в граничном условии для функции $p(\nu, t)$. Соотношение для функции плотности распределения $p(\nu, t)$ в точке $\nu = 0$ выводится из следующих соображений: за промежуток времени dt в системе возникает $I dt$ частиц нулевого размера, которые за рассматриваемый промежуток времени заполняют (в результате роста) интервал $(0, dv)$; с другой стороны, число частиц в этом же интервале размеров равно $p(0, t) dv$. Следовательно,

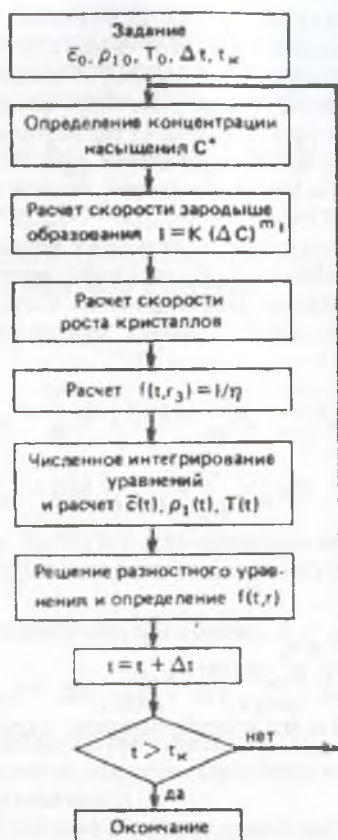
$$p(0, t) \frac{dv}{dt} = I,\tag{6.651}$$

или

$$p(0, t) \eta(0, t) = I,\tag{6.652}$$

где I – число возникающих зародышей в единицу времени в единице объема.

Рис. 6.34. Блок-схема алгоритма расчета периодического кристаллизатора с мешалкой



На рис. 6.34 изображена блок-схема алгоритма расчета периодического кристаллизатора.

Математическая модель непрерывного кристаллизатора с мешалкой. Так же как и в предыдущем случае, предполагается, что в аппарате происходит идеальное перемешивание частиц потока.

Интегрируя по объему аппарата, занятого смесью, систему уравнений математической модели процесса кристаллизации (6.626)–(6.634), (6.637), (6.639), (6.641), при принятых допущениях получим

$$\tau \frac{d\rho_K}{dt} = V(\rho_{K0} - \rho_K) - \tau \int_0^{v_M} \rho_{TB}^0 p \eta dv,$$

$$\tau \frac{d\bar{C}}{dt} = V(\bar{C}_0 - \bar{C}) - \tau M \int_0^{v_M} \rho_{TB}^0 p \eta dv,$$

$$\tau \frac{\partial p}{\partial t} + \tau \frac{\partial (p\eta)}{\partial v} + pV = 0,$$

$$p(0, t)\eta = I,$$

$$\tau \frac{d}{dt} \left\{ T [c_{\text{ж}} \rho_{\text{ж}} + c_{\text{тв}} \rho_{\text{тв}}] \right\} = V (c_{\text{ж}0} \rho_{\text{ж}0} T_0 - c_{\text{ж}} \rho_{\text{ж}} T - c_{\text{тв}} \rho_{\text{тв}} T) + \tau \Delta h \int_0^{\nu_{\text{м}}} \rho_{\text{тв}}^0 p \eta dv - \beta_T F (T - T_{\text{в}}), \quad (6.653)$$

$$\bar{C} = \rho_{\text{ж}} C,$$

$$\rho_{\text{тв}} = \int_0^{\nu_{\text{м}}} \rho_{\text{тв}}^0 p \eta dv,$$

$$c_{\text{ж}} = \left(1 - \frac{C}{M}\right) c_{\text{в}} + \frac{C}{M} c_{\text{тв}},$$

Здесь τ — объем аппарата; V — объемная скорость потока; $\bar{C}_0, \rho_{\text{ж}0}, T_0$ — концентрация, плотность и температура раствора на входе в аппарат.

Первые три уравнения в системе (6.653) получаются интегрированием дифференциальных уравнений сохранения массы по объему аппарата. Последнее уравнение (баланса теплоты) получено следующим образом. Сложим три уравнения энергии (6.637), (6.639), (6.641):

$$\begin{aligned} & \rho_{\text{ж}} \left(\frac{\partial E_{\text{ж}}}{\partial t} + u_{\text{ж}}^x \frac{\partial E_{\text{ж}}}{\partial x} + u_{\text{ж}}^y \frac{\partial E_{\text{ж}}}{\partial y} + u_{\text{ж}}^z \frac{\partial E_{\text{ж}}}{\partial z} \right) + \\ & + \int_0^{\nu_{\text{м}}} \rho_{\text{тв}}^0 p \eta \left(\frac{\partial E_{\nu}}{\partial t} + u_{\nu}^x \frac{\partial E_{\nu}}{\partial x} + u_{\nu}^y \frac{\partial E_{\nu}}{\partial y} + u_{\nu}^z \frac{\partial E_{\nu}}{\partial z} + \eta \frac{\partial E_{\nu}}{\partial \nu} \right) dv + \\ & + \int_0^{\nu_{\text{м}}} p \left(\frac{\partial E_{\sigma}^{\nu}}{\partial t} + u_{\nu}^x \frac{\partial E_{\sigma}^{\nu}}{\partial x} + u_{\nu}^y \frac{\partial E_{\sigma}^{\nu}}{\partial y} + u_{\nu}^z \frac{\partial E_{\sigma}^{\nu}}{\partial z} + \eta \frac{\partial E_{\sigma}^{\nu}}{\partial \nu} \right) dv = \\ & = \int_0^{\nu_{\text{м}}} \rho_{\text{тв}}^0 p \eta (i_{\text{ж}} - i_{\text{тв}}) dv. \end{aligned} \quad (6.654)$$

Прибавляя и вычитая из уравнения (6.654) выражение

$$\begin{aligned} & E_{\text{ж}} \frac{\partial \rho_{\text{ж}}}{\partial t} + E_{\text{ж}} \operatorname{div} (\rho_{\text{ж}} u) + \int_0^{\nu_{\text{м}}} [E_{\nu} \frac{\partial}{\partial t} (\rho_{\text{тв}}^0 p \eta) + \\ & + E_{\nu} \operatorname{div} (\rho_{\text{тв}}^0 p \eta u)] dv, \end{aligned} \quad (6.655)$$

получим

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\rho_{\text{ж}} E_{\text{ж}}) + \operatorname{div} (\rho_{\text{ж}} E_{\text{ж}} u) + \int_0^{\nu_{\text{м}}} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho_{\text{тв}}^0 p \eta E_{\nu}) + \right. \\ & \left. + \operatorname{div} (\rho_{\text{тв}}^0 p \eta E_{\nu} u) \right] dv = 0. \end{aligned} \quad (6.656)$$

Используя уравнения состояния

$$i_{\text{ж}} = E_{\text{ж}} = \frac{C}{M} \Delta h_s + \left(1 - \frac{C}{M}\right) c_{\text{в}} T + \frac{C}{M} c_{\text{тв}} T, \quad (6.657)$$

$$i_{\text{тв}} = E_{\text{в}} = c_{\text{в}} T, \quad (6.658)$$

уравнение (6.656) приведем к виду

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} [T(\rho_{\text{ж}} c_{\text{ж}} + \rho_{\text{тв}} c_{\text{тв}})] + \text{div}(\rho_{\text{ж}} T c_{\text{ж}} u + \\ + \rho_{\text{тв}} T c_{\text{тв}} u) = \Delta h \int_0^{v_{\text{м}}} \rho_{\text{тв}}^0 p \eta dv. \end{aligned} \quad (6.659)$$

Интегрируя уравнение (6.659) по объему, получим пятое уравнение в системе (6.653).

Для установившегося режима работы аппарата система уравнений (6.653) преобразуется к виду

$$\begin{aligned} V(\bar{C}_0 - \bar{C}) &= \tau M \int_0^{v_{\text{м}}} \rho_{\text{тв}}^0 p \eta dv, \quad \bar{C} = \rho_{\text{ж}} C, \\ V(\rho_{\text{ж}0} - \rho_{\text{ж}}) &= \tau \int_0^{v_{\text{м}}} \rho_{\text{тв}}^0 p \eta dv, \\ \tau \frac{d(p\eta)}{dv} + pV &= 0, \end{aligned} \quad (6.660)$$

$$p(0)\eta(0) = I,$$

$$\begin{aligned} V \left\{ c_{\text{ж}} \rho_{\text{ж}} T + c_{\text{тв}} \rho_{\text{тв}} T - c_{\text{ж}0} \rho_{\text{ж}0} T_0 \right\} = \\ = \tau \Delta h \int_0^{v_{\text{м}}} \rho_{\text{тв}}^0 p \eta dv - \beta_T F_{\text{уд}} \tau (T - T_{\text{в}}). \end{aligned}$$

Решение последней системы уравнений может быть проведено по следующему алгоритму.

1. Задают $V, T_{\text{ж}0}, \bar{C}_0, \rho_{\text{ж}0}, \tau, \bar{C}_{\text{ж}}^{\text{н}}, T^{\text{н}}, \epsilon_1, \epsilon_2$.
2. Оценивают величины пересыщения ΔC , скорости зародышеобразования I_3 и скорости роста кристаллов η .
3. Рассчитывают $p(v_3) = I_3/\eta$.
4. Интегрируют дифференциальное уравнение и рассчитывают $p(v)$.
5. Определяют $\rho_{\text{ж}}, \bar{C}, T$.
6. Если $|T^{(k+1)} - T^{(k)}| < \epsilon_1$ и $|\bar{C}^{(k+1)} - \bar{C}^{(k)}| < \epsilon_2$, то расчет оканчивают. В противном случае переходят к п. 2 при $\bar{C}^{(k+1)}$ и $T^{(k+1)}$.

Модель непрерывно действующего кристаллизатора со взвешенным слоем. Кристаллизаторы рассматриваемого типа включают две зоны: зону роста кристаллов, где кристаллическая фаза образует взвешенный слой, и зону пересыщения раствора. Обе зоны связаны между собой контуром циркуляции раствора. На рис. 6.35 приведена схема кристаллизатора. Исходный горячий концентрированный раствор, смешиваясь с циркулирующим раствором, поступает в теплообменник 2, где охлаждается на $0,1-2^\circ$, при-

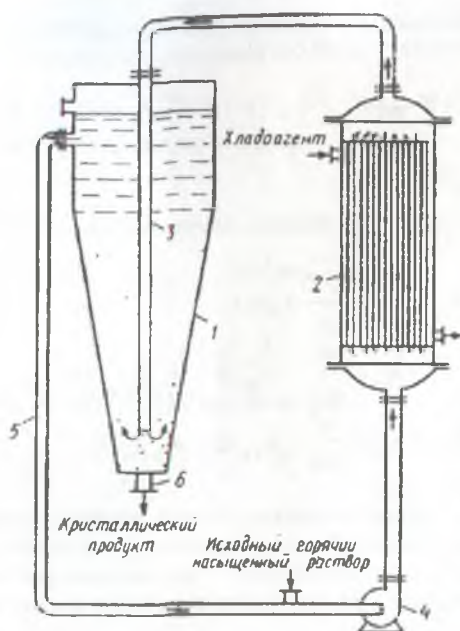


Рис. 6.35. Схема кристаллизатора со взвешенным слоем

обретая небольшое пересыщение. Далее пересыщенный раствор по трубе 3 поступает в нижнюю часть кристаллорастителя 1, и, поднимаясь вверх, поддерживает кристаллы во взвешенном состоянии. Из верхней части кристаллорастителя маточный раствор поступает в циркуляционную трубу 5, где вновь смешивается с горячим концентрированным исходным раствором, после чего насосом 4 подается в теплообменник, и процесс повторяется. По мере роста кристаллов в кристаллорастителе они опускаются вниз и выводятся из аппарата через выгрузное устройство 6.

При движении раствора через слой кристаллов вследствие их роста снижается пересыщение раствора. Выделяющаяся в процессе роста кристаллов скрытая теплота кристаллизации увеличивает температуру раствора, что, в свою очередь, приводит к изменению равновесной концентрации раствора.

В дальнейшем будем полагать, что основная масса зародышей возникает в нижней части аппарата, так как здесь создается наибольшее пересыщение раствора и объемная концентрация твердой фазы. Функцией распределения кристаллов по размерам будем пренебрегать, полагая, что в поперечном сечении аппарата кристаллы имеют один и тот же средний размер. Наконец, примем одинаковой в данном сечении аппарата температуру жидкой и кристаллической фаз. При сделанных допущениях общая система

уравнений, математического описания (6.626) – (6.634), (6.637), (6.639), (6.641) сведется к следующей системе:

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dx} (\rho_{\text{ж}} u_{\text{ж}} S) &= -JS, \\
 -\frac{d}{dx} (\rho_{\text{ТВ}} u_{\text{ТВ}} S) &= JS, \\
 \rho_{\text{ж}} u_{\text{ж}} \frac{dC}{dx} &= (C - M)J, \\
 (\rho_{\text{ж}} u_{\text{ж}} c_{\text{ж}} + \rho_{\text{ТВ}} u_{\text{ТВ}} c_{\text{ТВ}}) \frac{dT}{dx} &= \Delta h J, \\
 \rho_{\text{ж}} u_{\text{ж}} S \frac{du_{\text{ж}}}{dx} &= -\alpha_{\text{ж}} S \frac{dP}{dx} - \rho_{\text{ж}} g S - \rho_{\text{ТВ}} f_{\text{жв}} S - f_{\text{ст}}, \\
 \rho_{\text{ТВ}} u_{\text{ТВ}} S \frac{du_{\text{ТВ}}}{dx} &= -\alpha_{\text{ТВ}} S \frac{dP}{dx} - \rho_{\text{ТВ}} g S + \rho_{\text{ТВ}} f_{\text{жв}} S, \\
 -u_{\text{ТВ}} \frac{dm}{dx} &= j, \\
 J &= \frac{\alpha_{\text{ТВ}}}{\nu} j, \\
 \alpha_{\text{ж}} + \alpha_{\text{ТВ}} &= 1, \\
 \rho_{\text{ж}} &= \rho_{\text{ж}}^0 a_{\text{ж}}, \\
 \rho_{\text{ТВ}} &= \rho_{\text{ТВ}}^0 a_{\text{ТВ}}, \\
 j &= \frac{\beta \beta_{\text{кр}}}{\beta + \beta_{\text{кр}}} F_s (C - C^*), \\
 \text{Nu} &= \frac{\beta d}{D_{\text{ж}}} = 0,7 \text{Re}^{0,5} \text{Pr}^{0,33}, \\
 \text{Re} &= \frac{\rho_{\text{ж}}^0 (u_{\text{ж}} + u_{\text{ТВ}}) d}{\mu_{\text{ж}}}, \\
 C^* &= a_1 T + b_1.
 \end{aligned} \tag{6.661}$$

Здесь J – массовая скорость роста кристаллов в единице объема; j – массовая скорость роста одного кристалла; m – масса одного кристалла; S – площадь поперечного сечения аппарата; ν – объем кристалла; $d = \left(\frac{6\nu}{\pi}\right)^{1/3}$ – эквивалентный диаметр кристалла; F_s – поверхность одного кристалла; C^* – равновесная концентрация раствора; $c_{\text{ж}}$, $c_{\text{ТВ}}$ – теплоемкость жидкой и кристаллической фаз; Δh – удельная теплота кристаллизации; $f_{\text{ст}}$ – сила трения между жидкой фазой и стенками аппарата; a_1 , b_1 – коэффициенты зависимости равновесной концентрации от температуры.

Запишем граничные условия для системы уравнений (6.641):
при $x = 0$ (нижний конец аппарата):

$$C(0) = C_0, \alpha_{\text{ж}}(0) = \alpha_0, T(0) = T_0, u_{\text{ж}}(0) = u_{\text{ж}0}, m = m_0, \quad (6.662)$$

при $x = H$ (высота взвешенного слоя):

$$u_{\text{в}}(H) = 0. \quad (6.663)$$

Рассмотрим уравнения движения жидкой и кристаллической фаз:

$$\rho_{\text{ж}}^0 u_{\text{ж}} \frac{du_{\text{ж}}}{dx} = - \frac{dP}{dx} - \rho_{\text{ж}}^0 g - \frac{\rho_{\text{ТВ}} f_{\text{жв}}}{\alpha_{\text{ж}}} - \frac{f_{\text{СТ}}}{\alpha_{\text{ж}}}, \quad (6.664)$$

$$\rho_{\text{ТВ}}^0 u_{\text{в}} \frac{du_{\text{в}}}{dx} = - \frac{dP}{dx} - \rho_{\text{ТВ}}^0 g + \rho_{\text{ТВ}}^0 f. \quad (6.665)$$

Вычитая уравнение (6.665) из (6.664), получим

$$\rho_{\text{ж}}^0 u_{\text{ж}} \frac{du_{\text{ж}}}{dx} - \rho_{\text{ТВ}}^0 u_{\text{в}} \frac{du_{\text{в}}}{dx} = g(\rho_{\text{ТВ}}^0 - \rho_{\text{ж}}^0) - \frac{\rho_{\text{ТВ}}^0 f}{\alpha_{\text{ж}}} - \frac{f_{\text{СТ}}}{\alpha_{\text{ж}}}. \quad (6.666)$$

Оценка порядка величин членов уравнения (6.666) показывает, что первый, второй и пятый члены являются пренебрежимо малыми по сравнению с третьим и четвертым членами. Следовательно, в уравнении (6.666) можно пренебречь всеми членами, кроме третьего и четвертого:

$$g(\rho_{\text{ТВ}}^0 - \rho_{\text{ж}}(x)) = f(x) \frac{\rho_{\text{ТВ}}^0}{\alpha_{\text{ж}}(x)}. \quad (6.667)$$

Сила взаимодействия между жидкой и твердой фазами f определяется соотношением

$$f = \frac{3}{4} \frac{C_d}{d} \frac{\rho_{\text{ж}}^0}{\rho_{\text{ТВ}}^0} \frac{(u_{\text{ж}} - u_{\text{ТВ}})^3}{|u_{\text{ж}} - u_{\text{ТВ}}|}, \quad (6.668)$$

где C_d — коэффициент сопротивления при стесненном движении кристаллов, который находится по формуле

$$C_d = C_d^0 \alpha_{\text{ж}} y. \quad (6.669)$$

Здесь C_d^0 — коэффициент сопротивления одиночной частицы

$$C_d^0 = \frac{12,3}{\text{Re}^{0,5}}, \quad 13 \leq \text{Re} \leq 800; \quad (6.670)$$

$$y = \left(1 + \frac{5}{2} \alpha_{\text{ТВ}}\right) - \text{коэффициент стесненности.}$$

С учетом (6.668) — (6.670) уравнение (6.667) преобразуется к виду

$$(u_{\text{ж}} + u_{\text{в}})^{3/2} = \frac{4}{3} g(\rho_{\text{ТВ}}^0 - \rho_{\text{ж}}^0) \frac{d^{3/2}}{12,3 \mu_{\text{ж}}^{0,5} y}. \quad (6.671)$$

Таким образом, преобразованная математическая модель процесса кристаллизации в аппарате со взвешенным слоем имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dx} \rho_{\text{ж}} u_{\text{ж}} S &= -JS, \\
-\frac{d}{dx} \rho_{\text{ТВ}} u_{\text{в}} S &= JS, \\
\rho_{\text{ж}} u_{\text{ж}} \frac{dC}{dx} &= (C - M) J, \\
(\rho_{\text{ж}} u_{\text{ж}} C_{\text{ж}} + \rho_{\text{ТВ}} u_{\text{в}} C_{\text{ТВ}}) \frac{dT}{dx} &= \Delta h J, \\
(u_{\text{ж}} + u_{\text{в}})^{3/2} &= \frac{4}{3} g (\rho_{\text{ТВ}}^0 - \rho_{\text{ж}}^0) \frac{d^{3/2}}{12,3 \mu_{\text{ж}}^{0,5} \gamma}, \\
-u_{\text{в}} \frac{dm}{dx} &= j, \\
J &= \frac{a_{\text{ТВ}}}{\nu}, \\
a_{\text{ж}} + a_{\text{ТВ}} &= 1, \\
\rho_{\text{ж}} &= \rho_{\text{ж}}^0 a_{\text{ж}}, \\
\rho_{\text{ТВ}} &= \rho_{\text{ТВ}}^0 a_{\text{ТВ}}, \\
C^* &= a_1 T + b_1, \\
j &= \frac{\beta \beta_{\text{кр}}}{\beta + \beta_{\text{кр}}} F_3 (C - C^*),
\end{aligned} \tag{6.672}$$

Для решения системы уравнений (6.672) с граничными условиями (6.662), (6.663) представим ее в разностном виде. В результате получим:

Уравнение сохранения массы жидкой фазы:

$$\frac{\rho_{\text{ж}}^n u_{\text{ж}}^n S^n - \rho_{\text{ж}}^{n-1} u_{\text{ж}}^{n-1} S^{n-1}}{\Delta x} = -J^{n-1} S^{n-1}, \tag{6.673}$$

где n — текущий номер узла разбиения по координате x .

Уравнение сохранения массы кристаллической фазы:

$$\frac{\rho_{\text{ТВ}}^n u_{\text{в}}^n S^n - \rho_{\text{ТВ}}^{n-1} u_{\text{в}}^{n-1} S^{n-1}}{\Delta x} = J^{n-1} S^{n-1}. \tag{6.674}$$

Уравнение изменения концентрации растворенного вещества в растворе:

$$\rho_{\text{ж}}^{n-1} u_{\text{ж}}^{n-1} \frac{C^n - C^{n-1}}{\Delta x} = (C^{n-1} - M) J^{n-1}, \tag{6.675}$$

Уравнение изменения температуры смеси:

$$(\rho_{\text{ж}}^{n-1} u_{\text{ж}}^{n-1} C_{\text{ж}}^{n-1} + \rho_{\text{ТВ}}^{n-1} u_{\text{в}}^{n-1} C_{\text{ТВ}}^{n-1}) \frac{T^n - T^{n-1}}{\Delta x} = \Delta h J^{n-1}. \tag{6.676}$$

Уравнение изменения массы частиц m по высоте аппарата:

$$-u_v^{n-1} \frac{m^n - m^{n-1}}{\Delta x} = j^{n-1}. \quad (6.677)$$

Уравнение, отражающее изменение скорости частиц по высоте аппарата:

$$u_v^n = z \frac{d^n}{(y^n)^{2/3}} - u_{ж}^n, \quad (6.678)$$

где

$$z = \left[\frac{4g(\rho_{ТВ}^0 - \rho_{ж}^0)}{3 \cdot 1,25 (\rho_{ж}^0)^{0,5} \mu_{ж}^{0,5}} \right]^{2/3}. \quad (6.679)$$

Прежде чем перейти к алгоритму решения разностных уравнений (6.673)–(6.679), выполним некоторые преобразования. Отметим прежде всего, что

$$\rho_{ж} u_{ж} S - \rho_{ТВ} u_v S = M_0 = \text{const}. \quad (6.680)$$

Далее, из уравнения (6.673) получаем

$$\rho_{ж}^0 a_{ж}^n u_{ж}^n S^n = \Phi^{n-1}, \quad (6.681)$$

где

$$\Phi^{n-1} = \rho_{ж}^0 a_{ж}^{n-1} u_{ж}^{n-1} S^{n-1} - j^{n-1} S^{n-1} \Delta x. \quad (6.682)$$

После подстановки выражения (6.678) в уравнение (6.680) имеем

$$u_{ж}^n = \frac{M_0 + \rho_{ж}^0 (1 - a_{ж}^n) S^n \frac{z d^n}{(y^n)^{2/3}}}{\rho_{ж}^0 a_{ж}^n S^n + \rho_{ТВ}^0 (1 - a_{ж}^n) S^n}. \quad (6.683)$$

Наконец, подстановка значения $u_{ж}^n$ из последнего уравнения в уравнение (6.681) дает

$$\frac{\rho_{ж}^0 a_{ж}^n [M_0 + \rho_{ТВ}^0 (1 - a_{ж}^n) S^n \frac{z d^n}{(y^n)^{2/3}}]}{\rho_{ж}^0 a_{ж}^n + \rho_{ТВ}^0 (1 - a_{ж}^n)} = \Phi^{n-1}. \quad (6.684)$$

Уравнение (6.684) после преобразований приводится к алгебраическому уравнению второго порядка относительно объемной доли жидкой фазы $a_{ж}^n$:

$$a (a_{ж}^n)^2 + b a_{ж}^n + c = 0, \quad (6.685)$$

где

$$a = \frac{\rho_{ж}^0 \rho_{ТВ}^0 S^n z d^n}{(y^{n-1})^{2/3}} \quad (6.686)$$

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dx} \rho_{\text{ж}} u_{\text{ж}} S &= -JS, \\
-\frac{d}{dx} \rho_{\text{ТВ}} u_{\text{в}} S &= JS, \\
\rho_{\text{ж}} u_{\text{ж}} \frac{dC}{dx} &= (C - M) J, \\
(\rho_{\text{ж}} u_{\text{ж}} C_{\text{ж}} + \rho_{\text{ТВ}} u_{\text{в}} C_{\text{ТВ}}) \frac{dT}{dx} &= \Delta h J, \\
(u_{\text{ж}} + u_{\text{в}})^{3/2} &= \frac{4}{3} g (\rho_{\text{ТВ}}^0 - \rho_{\text{ж}}^0) \frac{d^{3/2}}{12,3 \mu_{\text{ж}}^{0,5} \gamma}, \\
-u_{\text{в}} \frac{dm}{dx} &= j, \\
J &= \frac{a_{\text{ТВ}}}{\nu}, \\
a_{\text{ж}} + a_{\text{ТВ}} &= 1, \\
\rho_{\text{ж}} &= \rho_{\text{ж}}^0 a_{\text{ж}}, \\
\rho_{\text{ТВ}} &= \rho_{\text{ТВ}}^0 a_{\text{ТВ}}, \\
C^* &= a_1 T + b_1, \\
j &= \frac{\beta \beta_{\text{кр}}}{\beta + \beta_{\text{кр}}} F_3 (C - C^*),
\end{aligned} \tag{6.672}$$

Для решения системы уравнений (6.672) с граничными условиями (6.662), (6.663) представим ее в разностном виде. В результате получим:

Уравнение сохранения массы жидкой фазы:

$$\frac{\rho_{\text{ж}}^n u_{\text{ж}}^n S^n - \rho_{\text{ж}}^{n-1} u_{\text{ж}}^{n-1} S^{n-1}}{\Delta x} = -J^{n-1} S^{n-1}, \tag{6.673}$$

где n — текущий номер узла разбиения по координате x .

Уравнение сохранения массы кристаллической фазы:

$$\frac{\rho_{\text{ТВ}}^n u_{\text{в}}^n S^n - \rho_{\text{ТВ}}^{n-1} u_{\text{в}}^{n-1} S^{n-1}}{\Delta x} = J^{n-1} S^{n-1}. \tag{6.674}$$

Уравнение изменения концентрации растворенного вещества в растворе:

$$\rho_{\text{ж}}^{n-1} u_{\text{ж}}^{n-1} \frac{C^n - C^{n-1}}{\Delta x} = (C^{n-1} - M) J^{n-1}, \tag{6.675}$$

Уравнение изменения температуры смеси:

$$(\rho_{\text{ж}}^{n-1} u_{\text{ж}}^{n-1} C_{\text{ж}}^{n-1} + \rho_{\text{ТВ}}^{n-1} u_{\text{в}}^{n-1} C_{\text{ТВ}}^{n-1}) \frac{T^n - T^{n-1}}{\Delta x} = \Delta h J^{n-1}. \tag{6.676}$$

Уравнение изменения массы частиц m по высоте аппарата:

$$-u_v^{n-1} \frac{m^n - m^{n-1}}{\Delta x} = J^{n-1}. \quad (6.677)$$

Уравнение, отражающее изменение скорости частиц по высот. аппарата:

$$u_v^n = z \frac{d^n}{(y^n)^{2/3}} - u_{ж}^n, \quad (6.678)$$

где

$$z = \left[\frac{4g(\rho_{ТВ}^0 - \rho_{ж}^0)}{3 \cdot 1,25 (\rho_{ж}^0)^{0,5} \mu_{ж}^{0,5}} \right]^{2/3}. \quad (6.679)$$

Прежде чем перейти к алгоритму решения разностных уравнений (6.673)–(6.679), выполним некоторые преобразования. Отметим прежде всего, что

$$\rho_{ж} u_{ж} S - \rho_{ТВ} u_v S = M_0 = \text{const}. \quad (6.680)$$

Далее, из уравнения (6.673) получаем

$$\rho_{ж}^0 a_{ж}^n u_{ж}^n S^n = \Phi^{n-1}, \quad (6.681)$$

где

$$\Phi^{n-1} = \rho_{ж}^0 a_{ж}^{n-1} u_{ж}^{n-1} S^{n-1} - J^{n-1} S^{n-1} \Delta x. \quad (6.682)$$

После подстановки выражения (6.678) в уравнение (6.680) имеем

$$u_{ж}^n = \frac{M_0 + \rho_{ж}^0 (1 - a_{ж}^n) S^n \frac{z d^n}{(y^n)^{2/3}}}{\rho_{ж}^0 a_{ж}^n S^n + \rho_{ТВ}^0 (1 - a_{ж}^n) S^n}. \quad (6.683)$$

Наконец, подстановка значения $u_{ж}^n$ из последнего уравнения в уравнение (6.681) дает

$$\frac{\rho_{ж}^0 a_{ж}^n [M_0 + \rho_{ТВ}^0 (1 - a_{ж}^n) S^n \frac{z d^n}{(y^n)^{2/3}}]}{\rho_{ж}^0 a_{ж}^n + \rho_{ТВ}^0 (1 - a_{ж}^n)} = \Phi^{n-1}. \quad (6.684)$$

Уравнение (6.684) после преобразований приводится к алгебраическому уравнению второго порядка относительно объемной доли жидкой фазы $a_{ж}^n$:

$$a (a_{ж}^n)^2 + b a_{ж}^n + c = 0, \quad (6.685)$$

где

$$a = \frac{\rho_{ж}^0 \rho_{ТВ}^0 S^n z d^n}{(y^{n-1})^{2/3}} \quad (6.686)$$

$$c = (\rho_{\text{ж}}^0 \alpha_{\text{ж}}^{n-1} u_{\text{ж}}^{n-1} S^{n-1} - \Delta x J^{n-1} S^{n-1}) \rho_{\text{тв}}^0. \quad (6.687)$$

$$b = -[\rho_{\text{ж}}^0 M_0 + a + c(\rho_{\text{тв}}^0 - \rho_{\text{ж}}^0)/\rho_{\text{тв}}^0]. \quad (6.688)$$

Решение уравнения (6.685), имеющее физический смысл, таково:

$$\alpha_{\text{ж}}^n = \frac{-b - \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}, \quad (6.689)$$

Рассмотрим теперь алгоритм решения разностной системы уравнений (6.673)–(6.679).

1. Задают значения $C_0, a_0, T_0, u_{\text{ж}0}, m_0, H, \rho_{\text{ж}}^0, \rho_{\text{тв}}^0, \mu_{\text{ж}}, c_{\text{тв}}, n=1, \Delta x$.
2. По уравнению (6.675) вычисляют значение концентрации C^n на n -м шаге.
3. Вычисляют массу кристалла m^n (по уравнению (6.677)) и эквивалентный диаметр d^n .
4. По уравнению (6.676) рассчитывают температуру T^n на n -м шаге интегрирования.
5. Определяют коэффициенты a, b, c квадратного уравнения (6.685) и по уравнению (6.689) оценивают значение $\alpha_{\text{ж}}^n$.
6. Рассчитывают плотности фаз $\rho_{\text{ж}}^n = \rho_{\text{ж}}^0 \alpha_{\text{ж}}^n$ и $\rho_{\text{тв}}^n = \rho_{\text{тв}}^0 (1 - \alpha_{\text{ж}}^n)$.
7. Рассчитывают коэффициент стесненности $y^n = 1 + (\frac{5}{2})(1 - \alpha_{\text{ж}}^n)$ и скорость жидкой фазы $u_{\text{ж}}^n$ (уравнение (6.683)).
8. По уравнению (6.678) определяют скорость падения кристаллов $u_{\text{р}}^n$ на n -м шаге по высоте аппарата.
9. Определяют значения $(C^*)^n, \text{Re}^n, \text{Pr}^n, j^n, J^n$.
10. Проверяют выполнение условия $u_{\text{р}}^n < \epsilon$. Если оно выполнено, то расчет оканчивают. В противном случае $n = n + 1$ и переходят к п. 2.

ЛИТЕРАТУРА

1. Александров И.А. Ректификационные и абсорбционные аппараты. Методы расчета и основы конструирования. — М.: Химия, 1978.
2. Ахназарова С.Л., Кафаров В.В. Оптимизация эксперимента в химии и химической технологии. — М.: Химия, 1985.
3. Бельков В.П., Кафаров В.В. Математические модели и алгоритмы расчета массообменных и тепловых процессов. — М.: МХТИ, 1985.
4. В.П. Бельков, В.В. Шестопапов, В.В. Кафаров. Математические модели химико-технологических процессов: текст лекций. — М.: МХТИ, 1981.
5. Бояринов А.И. Диссертация доктора технических наук. — М.: МХТИ, 1972.
6. Броунштейн Б.И., Железняк А.С. Физико-химические основы жидкостной экстракции. — М.—Л.: Химия, 1966.
7. Ветохин В.Н., Глебов М.Б. Итоги науки и техники. Сер. Процессы и аппараты химической технологии. Том 6. М.: ВИНТИ, 1979, 116–185.
8. Гельперн Н.И., Песбалк В.Л., Константиан А.Е. Структура потоков и эффективность колонных аппаратов химической промышленности. — М.: Химия, 1977.
9. Дорохов И.Н. Диссертация кандидата технических наук. М.: МХТИ, 1966.
10. Дорохов И.Н., Кафаров В.В., Нигматулин Р.И. / Прикл. математика и механика. 1975. 39. № 3. 485.
11. Закей А.Ю. Введение в моделирование химико-технологических процессов. — М.: Химия, 1982.
12. Каневец Г.Е., Зайцев И.Д., Головач И.И. Введение в автоматизированное проектирование теплообменного оборудования. — Киев: Наукова думка, 1985.
13. Кафаров В.В. Методы кибернетики в химии и химической технологии. — М.: Химия, 1985.
14. Кафаров В.В. Основы массопередачи. — М.: Высшая школа, 1979.
15. Кафаров В.В. Принципы создания безотходных химических производств. — М.: Химия, 1982.
16. Кафаров В.В., Арва П., Дорохов И.Н., Варгане Л. // Докл. АН СССР. 199. № 2. 402 (1971).
17. Кафаров В.В., Ветохин В.Н. Основы построения операционных систем в химической технологии. — М.: Наука, 1980.
18. Кафаров В.В., Ветохин В.Н.; Глебов М.Б. // Докл. АН СССР. 1980. Т. 253. № 4. 926–929.
19. Кафаров В.В., Ветохин В.Н., Глебов М.Б. // Докл. АН СССР. 1982. Т. 265. № 6. 1448–1451.
20. Кафаров В.В., Ветохин В.Н., Глебов М.Б. // Известия вузов. Т. XXII. № 4. 1979. 488–492.
21. Кафаров В.В., Дорохов И.Н. Системный анализ процессов химической технологии. Основы стратегии. Т. 1. — М.: Наука, 1976.

$$c = (\rho_{\text{ж}}^0 \alpha_{\text{ж}}^{n-1} u_{\text{ж}}^{n-1} S^{n-1} - \Delta x J^{n-1} S^{n-1}) \rho_{\text{тв}}^0. \quad (6.687)$$

$$b = -[\rho_{\text{ж}}^0 M_0 + a + c(\rho_{\text{тв}}^0 - \rho_{\text{ж}}^0)/\rho_{\text{тв}}^0]. \quad (6.688)$$

Решение уравнения (6.685), имеющее физический смысл, таково:

$$\alpha_{\text{ж}}^n = \frac{-b - \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}, \quad (6.689)$$

Рассмотрим теперь алгоритм решения разностной системы уравнений (6.673)–(6.679).

1. Задают значения $C_0, a_0, T_0, u_{\text{ж}0}, m_0, H, \rho_{\text{ж}}^0, \rho_{\text{тв}}^0, \mu_{\text{ж}}, c_{\text{тв}}, n=1, \Delta x$.
2. По уравнению (6.675) вычисляют значение концентрации C^n на n -м шаге.
3. Вычисляют массу кристалла m^n (по уравнению (6.677)) и эквивалентный диаметр d^n .
4. По уравнению (6.676) рассчитывают температуру T^n на n -м шаге интегрирования.
5. Определяют коэффициенты a, b, c квадратного уравнения (6.685) и по уравнению (6.689) оценивают значение $\alpha_{\text{ж}}^n$.
6. Рассчитывают плотности фаз $\rho_{\text{ж}}^n = \rho_{\text{ж}}^0 \alpha_{\text{ж}}^n$ и $\rho_{\text{тв}}^n = \rho_{\text{тв}}^0 (1 - \alpha_{\text{ж}}^n)$.
7. Рассчитывают коэффициент стесненности $y^n = 1 + (\frac{5}{2})(1 - \alpha_{\text{ж}}^n)$ и скорость жидкой фазы $u_{\text{ж}}^n$ (уравнение (6.683)).
8. По уравнению (6.678) определяют скорость падения кристаллов $u_{\text{р}}^n$ на n -м шаге по высоте аппарата.
9. Определяют значения $(C^*)^n, \text{Re}^n, \text{Pr}^n, j^n, J^n$.
10. Проверяют выполнение условия $u_{\text{р}}^n < \epsilon$. Если оно выполнено, то расчет оканчивают. В противном случае $n = n + 1$ и переходят к п. 2.

ЛИТЕРАТУРА

1. Александров И.А. Ректификационные и абсорбционные аппараты. Методы расчета и основы конструирования. — М.: Химия, 1978.
2. Ахназарова С.Л., Кафаров В.В. Оптимизация эксперимента в химии и химической технологии. — М.: Химия, 1985.
3. Бельков В.П., Кафаров В.В. Математические модели и алгоритмы расчета массообменных и тепловых процессов. — М.: МХТИ, 1985.
4. В.П. Бельков, В.В. Шестопапов, В.В. Кафаров. Математические модели химико-технологических процессов: текст лекций. — М.: МХТИ, 1981.
5. Бояринов А.И. Диссертация доктора технических наук. — М.: МХТИ, 1972.
6. Броунштейн Б.И., Железняк А.С. Физико-химические основы жидкостной экстракции. — М.-Л.: Химия, 1966.
7. Ветохин В.Н., Глебов М.Б. Итоги науки и техники. Сер. Процессы и аппараты химической технологии. Том 6. М.: ВИНТИ, 1979, 116–185.
8. Гельперин Н.И., Песбалк В.Л., Константиан А.Е. Структура потоков и эффективность колонных аппаратов химической промышленности. — М.: Химия, 1977.
9. Дорохов И.Н. Диссертация кандидата технических наук. М.: МХТИ, 1966.
10. Дорохов И.Н., Кафаров В.В., Нигматулин Р.И. / Прикл. математика и механика. 1975. 39. № 3. 485.
11. Закей А.Ю. Введение в моделирование химико-технологических процессов. — М.: Химия, 1982.
12. Каневец Г.Е., Зайцев И.Д., Головач И.И. Введение в автоматизированное проектирование теплообменного оборудования. — Киев: Наукова Думка, 1985.
13. Кафаров В.В. Методы кибернетики в химии и химической технологии. — М.: Химия, 1985.
14. Кафаров В.В. Основы массопередачи. — М.: Высшая школа, 1979.
15. Кафаров В.В. Принципы создания безотходных химических производств. — М.: Химия, 1982.
16. Кафаров В.В., Арва П., Дорохов И.Н., Варгане Л. // Докл. АН СССР. 199. № 2. 402 (1971).
17. Кафаров В.В., Ветохин В.Н. Основы построения операционных систем в химической технологии. — М.: Наука, 1980.
18. Кафаров В.В., Ветохин В.Н.; Глебов М.Б. // Докл. АН СССР. 1980. Т. 253. № 4. 926–929.
19. Кафаров В.В., Ветохин В.Н., Глебов М.Б. // Докл. АН СССР. 1982. Т. 265. № 6. 1448–1451.
20. Кафаров В.В., Ветохин В.Н., Глебов М.Б. // Известия вузов. Т. XXII. № 4. 1979. 488–492.
21. Кафаров В.В., Дорохов И.Н. Системный анализ процессов химической технологии. Основы стратегии. Т. 1. — М.: Наука, 1976.

22. Кафаров В.В., Дорохов И.Н., Кольцова Э.М. Системный анализ процессов химической технологии. Процессы массовой кристаллизации из растворов и газовой фазы. — М.: Наука, 1983.
23. Кафаров В.В., Дорохов И.Н., Луговой Ю.Е., Молчанова Н.Е. // ТОХТ. Т. VIII. № 4. 1974. 489—501.
24. Кроу К., Гамилец А., Хоффман Т. Математическое моделирование химических производств. — М.: Мир, 1973.
25. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Механика сплошных сред. — М.: Гостехтеоретиздат, 1954.
26. Левич В.Г. Физико-химическая гидродинамика. — М.: Физматгиз, 1959.
27. Лыков А.В. Теория сушки. — М.: Энергия, 1968.
28. Марчук Г.И. Методы вычислительной математики. — М.: Наука, 1977.
29. Матур К., Эпстайн Н. Фонтанирующий слой. — Л.: Химия, 1978.
30. Меньшиков В.В. Диссертация кандидата технических наук. — М.: МХТИ, 1979.
31. Методические указания по расчету процесса жидкофазной экстракции. — М.: МХТИ, 1983.
32. Нигматули Р.И. // Прикл. математика и механика. 1971. 35. № 3. 451.
33. Петлюк Ф.Б., Серафимов Л.А. Многокомпонентная ректификация. Теория и расчет. — М.: Химия, 1983.
34. Писаренко В.Н. Итоги науки и техники // Сер. Процессы и аппараты химической технологии. Т. 9. — М.: ВИНТИ, 1981, 3—86.
35. Писаренко В.Н., Полянский М.А., Степаненко В.В., Кафаров В.В. // Известия вузов. Химия и химическая технология. Т. 28. Вып. 2. 1985. 106—110.
36. Плановский А.Н., Муштаев В.И., Ульянов В.М. Сушка дисперсных материалов в химической промышленности. — М.: Химия, 1979.
37. Прауэни Дж. М. Машинный расчет парожидкостного равновесия. — М.: Химия, 1971.
38. Рамм В.М. Абсорбция газов. — М.: Химия, 1976.
39. Романков П.Г., Курочкина М.И. Гидромеханические процессы химической технологии. — Л.: Химия, 1974.
40. Романков П.Г., Рашковская Н.Б. Сушка во взвешенном состоянии. — Л.: Химия, 1979.
41. Романков П.Г., Фролов В.Ф. Теплообменные процессы химической технологии. — Л.: Химия, 1982.
42. Справочник химика. Т. 1. — Л.—М.: Энергия, 1968.
43. Соу С. Гидродинамика многофазных систем. — М.: Мир, 1971.
44. Таганов И.Н. Моделирование процессов массо- и энергопереноса: нелинейные системы. — Л.: Химия, 1979.
45. Годес О.М., Себалло В.А., Гольцикер А.Д. Массовая кристаллизация из растворов. — Л.: Химия, 1984.
46. Трейбал Р. Жидкостная экстракция. — М.: Химия, 1966.
47. Тябин Н.В. Теория равновесия и переноса в химико-технологических процессах. — Волгоград: Волгоградский политехн. ин-т, 1983.
48. Усачева И.И., Шестопалов В.В., Кафаров В.В. // Труды МХТИ. Серия: Процессы и аппараты и химическая кибернетика. Вып. 106. 1979. С. 135.
49. Франк-Каменецкий Д.А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. — М.: Наука, 1967.
50. Фрэнкс Р. Математическое моделирование в химической технологии. — М.: Химия, 1971.
51. Шестопалов В.В. Математические модели химико-технологических процессов и систем. Ч. 1. — М.: МХТИ, 1977.
52. Гильденблат И.А. Влияние структуры потоков на эффективность работы теплообменных аппаратов: пример расчета по курсу процессов и аппаратов. — М.: МХТИ, 1979.