

**И.И. Белоглазов**

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ И  
ОБЪЕКТОВ В ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ**

*Методические указания к курсовой работе.*

**САНКТ-ПЕТЕРБУРГ  
2015**

И.И. Белоглазов

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ И ОБЪЕКТОВ В ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

*Методические указания к курсовой работе.*

САНКТ-ПЕТЕРБУРГ  
2015

УДК 66.01.001

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ И ОБЪЕКТОВ В ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ:** Методические указания к курсовой работе. / 34 с.

Сост.: *И.И. Белоглазов*, СПб, 2015.

В методическом указании рассмотрены примеры решения задач по моделированию гидродинамических процессов в химических реакторах с использованием системы компьютерной математики Mathcad.

В нем содержатся теоретические материалы и методика выполнения работ по установлению поля скоростей потока в объеме реактора, включая диффузионный перенос, по построению модели для описания гидродинамической структуры потока и явлений переноса, а также по анализу полученной модели для выявления отклонений от идеальности потока.

Рассмотрены вопросы моделирования отклика аппарата на входное импульсное возмущение на основе ячеечной модели и на основе известных аналитических решений.

Методическое указание соответствует содержанию дисциплины «Моделирование процессов и объектов в химической технологии» государственных образовательных стандартов.

Предназначено для бакалавров, магистров, аспирантов высших учебных заведений, для специальностей 220700 «Автоматизация технологических процессов и производств», 151000 «Технологические машины и оборудование».

Рис. 15, табл. 1, библиогр. 5 назв.

## Содержание

1. Построение математической модели структуры потоков.....	5
1.1. Определение среднего времени пребывания .....	6
1.2. Определение коэффициента продольного перемешивания импульсным методом .....	8
2. Алгоритм расчета коэффициента продольного перемешивания и значения критерия пекле .....	15
3.Методика проведения работы.....	16
3.1 моделирование процесса изменения концентрации индикатора в аппарате при импульсном возмущении на основе ячеечной модели .....	22
Выводы .....	30
Литература.....	33

## ВВЕДЕНИЕ

В методическом указании рассматривается применение методов математического моделирования для исследования структуры потоков в аппаратах химической технологии на основе экспериментальных исследований, сущность которых заключается в том, что в поток на входе в аппарат каким-либо способом вводят индикатор. На выходе из аппарата измеряют концентрацию индикатора как функцию времени. В качестве индикатора используют пассивную примесь-трассер (краситель, раствор соли или кислоты, изотопы, электролиты).

В общем случае, закон изменения концентрации индикатора во времени на входе потока в аппарат может быть произвольным. В методическом указании рассматривается импульсный ввод индикатора.

Материал по данной тематике, изложенный в существующей учебной литературе недостаточно отражает вопросы использования компьютерных технологий при исследовании структуры потоков методом математического моделирования.

Глава первая раскрывает общие вопросы, определяются основные понятия, связанные с проведением эксперимента при исследовании структуры потоков и обработкой полученных экспериментальных данных.

В главе второй подробно рассмотрен алгоритм расчета коэффициента продольного перемешивания и значения критерия Пекле на основе решения уравнений математического описания дифференциальной функции распределения времени пребывания.

Глава третья имеет практический характер. Здесь изложена методика проведения расчетно-графического задания. В ней приводятся компьютерные технологии моделирования процесса изменения концентрации индикатора в аппарате при импульсном возмущении на основе ячеечной модели, моделирование процесса изменения концентрации индикатора в аппарате при импульсном возмущении на основе аналитического решения.

В конце методического указания приведены требования к отчету о выполненной работе, контрольные вопросы и приведены варианты заданий для самостоятельного решения.

## 1. ПОСТРОЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ СТРУКТУРЫ ПОТОКОВ

Построение математической модели структуры потока в химических реакторах начинается с выбора модели для гидродинамики.

Известны разные подходы к изучению структуры потока и влияния этой структуры на ход химических процессов. Наиболее полную информацию о структуре потока можно получить, зная скорость жидкости в любой точке аппарата, т. е. получив поле скоростей.

Второй возможный подход – описание структуры однофазного потока на основе распределения времени пребывания.

Поле скоростей – сложная трехмерная структура, описание которой должно содержать функции трех координат. Нестационарность добавляет четвертую – время.

Математическое описание поля скоростей получается в виде систем дифференциальных уравнений в частных производных. Универсальным видом математической модели гидродинамики является уравнение, характеризующее изменение концентрации вещества  $C$  в потоке по осям  $x$ ,  $y$ ,  $z$  во времени  $t$ , обусловленное движением этого потока с линейными скоростями  $v_x$ ,  $v_y$ ,  $v_z$  диффузией с коэффициентом  $D$ :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -v_x \frac{\partial C}{\partial x} - v_y \frac{\partial C}{\partial y} - v_z \frac{\partial C}{\partial z} + D \left( \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right)$$

Решить такую систему с соответствующими краевыми условиями даже с помощью современных ПЭВМ удастся лишь в простейших случаях.

При построении модели гидродинамики следует учитывать, что модель должна:

1. Отражать физическую сущность реального потока и в то же время иметь достаточно простое математическое описание.
2. Позволять находить параметры модели расчетным или экспериментальным способом.

3. Быть удобной для использования при расчетах конкретных процессов.

### 1.1. Определение среднего времени пребывания

Для определения гидродинамического состояния в аппарате во входящий поток добавляют порцию какой-либо примеси, называемой индикатором или трассером. Индикатор должен быть легко количественно определен. На выходе из аппарата измеряют концентрацию индикатора  $C_{инд}$  как функцию времени  $t$ . Схема экспериментальной установки изображена на рисунке 1.

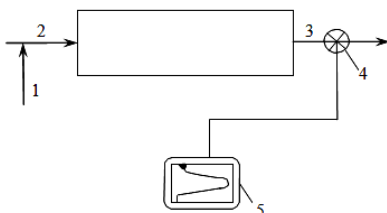


Рисунок 1 – Схема установки  
(1 – ввод индикатора; 2 – вход в аппарат; 3 – выход из аппарата; 4 – датчик концентрации индикатора; 5 – самопишущий прибор)

В момент  $t=0$  на входе резким импульсом вводится индикатор (рисунок 1, рисунок 2а). На выходе (рисунок 2б) вначале  $C_{инд} = 0$ : ни одна частица индикатора не успела дойти до выхода. В момент  $t_1$  выхода достигает самая быстрая часть потока, появляется индикатор. Далее его концентрация нарастает до момента  $t_2$ , а затем начинает убывать: основная масса потока прошла, выходят те частицы индикатора, которые попали в зоны циркуляции или застоя.

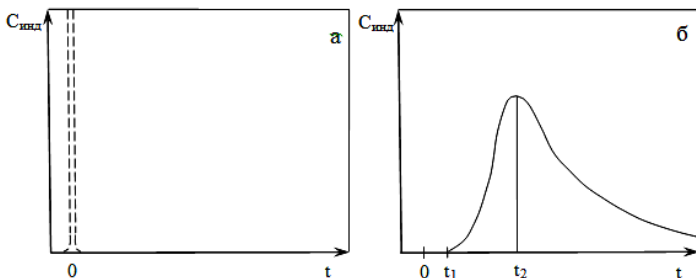


Рисунок 2 – Типичный график зависимости  $C_{инд}$  от  $t$   
( импульсное возмущение (а) и сигнал отклика (б) )

Результаты эксперимента позволяют определить среднее время пребывания  $\tau$ :

$$\tau = \frac{\int_0^{\infty} t \cdot C_{инд.}(t) \cdot dt}{\int_0^{\infty} C_{инд.}(t) \cdot dt}$$

Время пребывания определяется по формуле:

$$\tau = \frac{V_{реактора}}{W_{объемн.расход}}$$

По полученным экспериментальным данным можно решить одну из двух задач:

- либо по известному объему реактора  $V$  рассчитать расход жидкости  $w$ ,
- либо по известному объемному расходу  $w$  – неизвестный объем  $V$ .

Для химической технологии важен вариант, когда известен общий объем аппарата, но поток заполняет не весь объем. Необходимо определить, какая часть аппарата занята потоком.

**Пример** – Объем аппарата составляет 0,012 м<sup>3</sup>. Аппарат заполнен протекающей жидкостью без воздушных пузырей. При расходе жидкости 0,0021 м<sup>3</sup>/с проведен эксперимент с импульсным вводом индикатора. На выходе из аппарата получены следующие данные:

Таблица 1 – Экспериментальные данные

t, с	0	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100	>100
0,01 $C_{инд}$ , моль/м <sup>3</sup>	0	0	1	4	11	10	7	4	2	0,5	0	0

Так как концентрация индикатора при  $t > 100$  равна нулю, то в качестве верхнего предела интеграла можно принять не  $\infty$ , а 100.



Используя известные методы вычисления значения определенного интеграла, находим значение  $\tau$ , которое составляет 50,5 с. Вычисляем также значение объема аппарата  $V = \tau \cdot w$ , которое составляет 0,0106 м<sup>3</sup>. Таким образом, можно предположить, что в аппарате имеет место застойная зона объемом 0,0014 м<sup>3</sup>.

По экспериментальным данным можно также определить дисперсию времени пребывания –  $\sigma^2$  по формуле:

$$\sigma^2(\tau) = \frac{\int_0^{\infty} t^2 \cdot C_{инд.}(t) \cdot dt}{\tau^2 \int_0^{\infty} C_{инд.}(t) \cdot dt} - 1$$

Как известно, дисперсия характеризует разброс данных относительно среднего значения. Чем больше дисперсия, тем сильнее проявляется продольное перемешивание жидкости. Идеальные потоки характеризуются следующими значениями: для вытеснения  $\sigma^2 = 0$ , для смешения  $\sigma^2 = 1$ . В рассматриваемом примере  $\sigma^2 = 0,085$ . Следовательно, поток ближе к модели идеального вытеснения.

## 1.2. Определение коэффициента продольного перемешивания импульсным методом

Другой важной характеристикой гидродинамической структуры однофазных потоков является коэффициент продольного перемешивания, который можно вычислить через статистические параметры дифференциальной функции распределения времени пребывания вещества в аппарате, получаемой экспериментально с помощью импульсного метода.

Импульсный метод широко применяется при экспериментальном определении коэффициента продольного перемешивания вещества в потоке газа или жидкости (и в газожидкостном потоке) в аппарате непрерывного действия.

Способ экспериментального определения дифференциальной функции аналогичен выше описанному способу определения среднего времени пребывания в аппарате [1].

В проточный аппарат (рисунок 1) мгновенно вводится небольшое количество  $Q$  индикатора или трассера. В моменты времени  $t_1, t_2 \dots$  после ввода при  $t_0 = 0$  из выходящего потока отбираются пробы и в них определяется концентрация введенного вещества-индикатора жидкости (газа)), где  $i$  – номер пробы.  $C_{инд.i}$  – кг индикатора/(м<sup>3</sup>жидкости (газа)), где  $i$  – номер пробы.

Дифференциальная функция распределения строится в координатах:

$$\text{абсцисса: } \theta_i = t_i / \tau, \quad \text{ордината: } \psi_i = C_{инд.i} \cdot \frac{V}{Q},$$

где  $V$  – объем аппарата от места ввода индикатора до места отбора пробы,

$t_i$  – время от начала ввода индикатора при отборе  $i$  - й пробы,

$C_{инд.i}$  – концентрация введенного индикатора (кг индикатора/м<sup>3</sup>) жидкости при отборе  $i$  -ой пробы,

$Q$  – количество индикатора,

$t = \frac{V}{w}$  – среднее время пребывания

Наибольшее распространение получил метод идентификации коэффициента продольного перемешивания, основанный на сравнении различных числовых характеристик функций отклика. При этом используется понятие момента, заимствованное из теории вероятностей, согласно которой функция распределения случайной величины может быть охарактеризована числовыми величинами (моментами различных порядков) теоретических вероятностных характеристик: начальных моментов, дисперсии, моды, плотности вероятности моды и т. п.

Вероятностные характеристики могут быть выражены через критерий Пекле продольного перемешивания (безразмерное число, которое характеризует соотношение между конвективным и

молекулярным процессами переноса (в англоязычной литературе известно как число Боденштейна)), который определяется по формуле:

$$Pe = v \cdot L/D$$

где  $v$  – линейная скорость потока;

$L$  – длина аппарата;

$D$  – коэффициент продольного перемешивания.

Определяя значения вероятностных характеристик по дифференциальной функции распределения и используя уравнения связи вероятностных характеристик с числами Пекле, находят значения коэффициентов продольного перемешивания.

Величина коэффициентов перемешивания сильно колеблется от изменения геометрических характеристик аппарата, молекулярных свойств среды, режима перемешивания и других условий протекания процесса.

На основе полученной экспериментальной дифференциальной функции распределения определяются характеристики, необходимые для расчета коэффициента продольного перемешивания.

Моменты распределения различных порядков имеют следующий вид

Момент первого порядка

$$a_1 = \frac{\sum_{i=1}^N \psi_i \cdot \theta_i}{\sum_{i=1}^N \psi_i} \quad (1)$$

Момент второго порядка

$$a_2 = \frac{\sum_{i=1}^N \psi_i \cdot \theta_i^2}{\sum_{i=1}^N \psi_i} \quad (2)$$

Момент третьего порядка

$$a_3 = \frac{\sum_{i=1}^N \psi_i \cdot \theta_i^3}{\sum_{i=1}^N \psi_i} \quad (3)$$

Момент четвертого порядка

$$a_4 = \frac{\sum_{i=1}^N \psi_i \cdot \theta_i^4}{\sum_{i=1}^N \psi_i} \quad (4)$$

Широко используются также две другие характеристики: мода и плотность вероятности моды.

Модой  $m$  теоретического распределения называется значение абсциссы максимума кривой плотности распределения случайной величины, а плотностью вероятности моды  $C$  – значение соответствующей ординаты кривой.

$$\text{Мода } m = \psi_i, \text{ при которой достигается максимум } (\theta_i) \quad (5)$$

Плотность вероятности моды

$$C = \max(\theta_i) \quad (6)$$

Центральный момент второго порядка, называемый дисперсией, определяется по формуле:

$$\sigma^2 = a_2 - a_1^2 \quad (7)$$

В качестве показателя асимметрии используется следующее выражение:

$$a = \frac{(a_3 - 3 \cdot a_1 \cdot a_2 + 2 \cdot a_1^3)}{(a_2 - a_1^2)^{1.5}} \quad (8)$$

Показатель эксцесса

$$\varepsilon = \frac{a_4 - 4 \cdot a_1 \cdot a_3 + 6 \cdot a_2 \cdot a_1^2 - 3 \cdot a_1^4}{(a_2 - a_1^2)^2} \quad (9)$$

Уравнения связи вероятностных характеристик с критерием Пекле находятся из решения следующих уравнений:

$$a_1 = 1 + 1/Pe, \quad (10)$$

$$a_2 = 1 + 4/Pe + 4/Pe^2, \quad (11)$$

$$a_3 = 1 + 9/Pe + 30/Pe^2 + 30/Pe^3, \quad (12)$$

$$a_4 = 1 + 16/Pe + 108/Pe^2 + 336/Pe^3 + 336/Pe^4, \quad (13)$$

$$m = Pe/(2 + Pe), \quad (14)$$

$$c_m = a_2 \cdot a_3 - a_4, \quad (15)$$

$$\text{где } a_2 = \left(\frac{2 + Pe}{\pi}\right)^{0.5}, \quad a_3 = \exp\left(\frac{-1}{2 + Pe}\right),$$

$$a_4 = \frac{Pe}{2} \cdot \left[ a_1 \cdot \left[ \left(1 + Pe + \frac{Pe^2}{2} + \frac{Pe^3}{6}\right) + \frac{Pe^4}{24} + \frac{Pe^5}{120} \right] \right],$$

$$a_1 = \operatorname{erfc}\left(\frac{1 + Pe}{(2 + Pe)^{0.5}}\right),$$

*erfc* – функция ошибок,

$$\sigma^2 = 2/Pe + 3/Pe^2, \quad (16)$$

$$a = (20 + 12 \cdot Pe)/(3 + 2 \cdot Pe)^{1.5}, \quad (17)$$

$$\varepsilon = (210 + 120 \cdot Pe)/(3 + 2 \cdot Pe)^2, \quad (18)$$

Уравнения (1)-(18) составляют математическое описание экспериментальной дифференциальной функции распределения времени пребывания частиц в аппарате соответственно через вероятностные характеристики и критерий Пекле продольного перемешивания. Окончательное значение критерия Пекле можно определить как среднее значение Пекле –  $Re_{cp}$ , найденное в отдельности по каждой вероятностной характеристике.

Значение коэффициента продольного перемешивания определяется по формуле:  $D = v \cdot L / Pe_{cp}$ .

Для практических целей достаточно ограничиться вычислением значения Пекле лишь по начальным моментам первого и второго порядка, моде и дисперсии. Целесообразно использовать также плотность вероятности моды.

Показатели асимметрии и эксцесса для расчета числа  $Pe$  обычно не используются, так как значения этих вероятностных характеристик в основном определяются моментами высших порядков и поэтому весьма чувствительны к погрешностям эксперимента и, следовательно, могут приводить к противоречивым результатам.

Таким образом, процедура определения коэффициента продольного перемешивания импульсным методом сводится к следующему:

- по экспериментальным данным распределения среднего времени пребывания частиц в аппарате, полученных импульсным методом, строится дифференциальная функция распределения;
- из функции распределения по формулам (1) – (9) вычисляются значения вероятностных характеристик;
- по формулам связи (10)-(18) вероятностных характеристик с критерием Пекле для продольного перемешивания находятся его значения;
- определяется среднее значение критерия Пекле и из его выражения вычисляется значение коэффициента продольного перемешивания.

**Цель работы** – практическое освоение методики расчета коэффициента продольного перемешивания по экспериментальной

дифференциальной функции распределения среднего времени пребывания частиц в аппарате.

## 2. АЛГОРИТМ РАСЧЕТА КОЭФФИЦИЕНТА ПРОДОЛЬНОГО ПЕРЕМЕШИВАНИЯ И ЗНАЧЕНИЯ КРИТЕРИЯ ПЕКЛЕ

**Программа расчета** – Решение уравнений математического описания кривой дифференциальной функции распределения времени пребывания состоит из вычисления вероятностных характеристик по уравнениям (1) – (9) и нахождения значений критериев Пекле из уравнений (10) – (18).

Арифметические выражения (1) – (9) вычисляются при соответствующих значениях  $\theta_i = t_i/\tau$  и  $\psi_i = C_{\text{инд.,}i} \frac{V}{Q}$ , полученных при эксперименте.

Уравнения (10) – (18) представляют собой независимые одно от другого алгебраические уравнения первой – четвертой степени и их решение в общем случае может быть сведено к отысканию корней (критериев Пекле) каждого из уравнений по известным формулам.

В уравнениях (10) – (18) за исключением случаев полного вытеснения ( $Pe \rightarrow \infty$ ) и полного смещения ( $Pe \rightarrow 0$ ) всегда значение корней  $Pe > 0$ .

Решение задачи можно выполнить с помощью системы компьютерной математики Mathcad с использованием встроенной функции для определения корней нелинейного уравнения – *Функция поиска корня root*. Встроенная функция **root** используется для решения одного уравнения с одним неизвестным. Функция имеет вид: **root**( $f(x), x$ ), где  $f(x)$  – левая часть решаемого уравнения. Функция **root**( $f(x), x$ ) вычисляет значение  $x$ , которое должно обратить выражение  $f(x)$  в ноль.

Переменная  $x$  обязательно должна получить числовое значение перед использованием функции **root**. Задание начального приближения является важным этапом при реализации итерационных процессов. От выбора начального приближения зависят время решения задачи и сам результат (если решений несколько). Есть и встроенная функция **root**( $f(x), x, a, b$ ), которая учитывает пределы изоляции корня  $[a, b]$ . Такое использование функции позволяет избежать вычисления корней, не представляющих интереса. Кроме того, в этом случае не нужно задавать начальное приближение переменной  $x$ , так как ее значение определено интервалом  $[a, b]$ .



### 3.МЕТОДИКА ПРОВЕДЕНИЯ РАБОТЫ

**Задание** – Через насадочный аппарат длиной  $L = 30$  м (насадочный коэффициент  $\gamma = 0,78$ ), внутренним диаметром  $d = 0,03$  м протекает жидкость с объемной скоростью  $w = 0,002$  м<sup>3</sup>/с.

Необходимо выполнить расчет коэффициента продольного перемешивания по экспериментальной дифференциальной функции распределения среднего времени пребывания частиц в аппарате.

Для выполнения работы необходимо выполнить следующие этапы:

**Первый этап** – проведение эксперимента. На входе в аппарат импульсным методом подается определенное количество ( $Q=0,3$  кг) трассирующего вещества (индикатора). На выходе аппарата замеряется концентрация этого индикатора  $C_{инд}$  (кг/м<sup>3</sup>) во времени  $t$ . Зависимость  $C_{инд}$  от времени  $t$  представляет собой дифференциальную функцию распределения времени пребывания (рисунок 3).

**Второй этап** – вычисление вероятностных характеристик.

Для вычисления вероятностных характеристик дифференциальную функцию распределения времени пребывания, полученную на основе экспериментальных данных, строим в координатах  $\psi, \theta$  (рисунок 4).

По приводимым формулам (1)-(18) вычисляем значения вероятностных характеристик и соответствующие им значения чисел Пекле. Находим средние значения  $Pe_{cp}$  по всем вероятностным характеристикам, а также вычисляем значение по четырем вероятностным характеристикам: начальным моментам первого и второго порядков, моде и дисперсии и по всем девяти характеристикам.  $Pe$

Протокол определения вероятностных характеристик и значений Пекле с помощью Mathcad представлен на рисунках 5, 6, 7, 8.

В программе учтены случаи, когда  $\alpha_1 = 1$  и когда мода  $m > 1$ . В этих случаях соответствующие им значения  $Pe$  не вычисляются, а средние значения числа Пекле определяются с меньшим количеством слагаемых.

**Третий этап** – выбор вида модели. Выбор математической модели можно сделать на основе анализа функции распределения времени пребывания частиц в аппарате и соотношения его размеров. Исходя из соотношения размеров аппарата ( $L/d > 20$ ), можно выбрать либо модель идеального вытеснения, либо однопараметрическую диффузионную модель.

Уравнение этой динамической модели для случая распространения индикатора в аппарате имеет вид:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -v_x \frac{\partial C}{\partial x} + D \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

Начальные условия:  $\forall x$  при  $t = 0$   $C(t, x) = C(0, x) = C_{\text{инд.}}$

Граничные условия:  $\forall t$  при  $x = 0$   $v \cdot (0 - C(t, 0)) + D \cdot \frac{\partial C}{\partial x}(t, 0) = 0$   $\forall t$  при  $x = L$   $\frac{\partial C}{\partial t}(t, L) = 0$

**Четвертый этап** – выбор метода и моделирование процесса изменения концентрации индикатора в аппарате при импульсном возмущении

### Исходные данные реактора

$$w := 0.002 \quad L := 30 \quad d := 0.03 \quad Q := 0.3 \quad \gamma := 0.78$$

$$V := \pi \cdot \frac{d^2}{4} \cdot L \cdot (1 - \gamma) \quad V = 4.665 \times 10^{-3} \quad \tau := \frac{V}{w}$$

$$\tau = 2.333 \quad v := \frac{w}{V} \quad v = 0.429$$

### Экспериментальные данные

$$N := 24 \quad i := 1..N$$

N - количество экспериментальных точек

t<sub>i</sub> := Cind<sub>i</sub> :=

0	0
0.25	0.0004
0.5	0.018
0.75	0.259
1	1.09
1.25	3.022
1.5	5.77
1.75	7.513
2	8.728
2.25	8.392
2.5	7.734
2.75	5.672
3	4.7
3.25	2.985
3.5	2.278
3.75	1.311
4	0.762
4.25	0.509
4.5	0.268
4.75	0.141
5	0.088
5.25	0.041
5.5	0.024
5.75	0.013

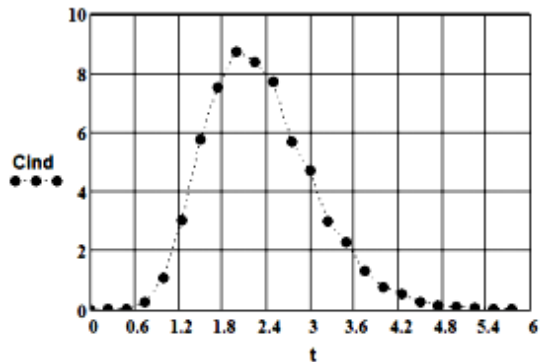


Рисунок 3 – Исходные данные и построенная по ним функция распределения времени пребывания

**Преобразование экспериментальных данных в безразмерные величины**

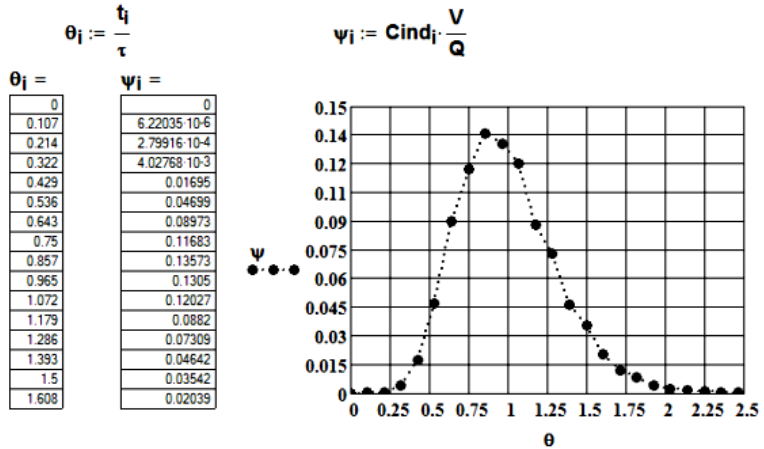


Рисунок 4 – Дифференциальная функция распределения времени пребывания в координатах  $\psi, \theta$

**Вычисление вероятностных характеристик**

**Вычисление значений начальных моментов распределения**

$$\alpha_1 := \frac{\sum_{i=1}^N (\theta_i \cdot \psi_i)}{\sum_{i=1}^N \psi_i}$$

$\alpha_1 = 0.998$

$$\alpha_2 := \frac{\sum_{i=1}^N [(\theta_i)^2 \cdot \psi_i]}{\sum_{i=1}^N \psi_i}$$

$\alpha_2 = 1.095$

$$\alpha_3 := \frac{\sum_{i=1}^N [(\theta_i)^3 \cdot \psi_i]}{\sum_{i=1}^N \psi_i}$$

$\alpha_3 = 1.308$

$$\alpha_4 := \frac{\sum_{i=1}^N [(\theta_i)^4 \cdot \psi_i]}{\sum_{i=1}^N \psi_i}$$

$\alpha_4 = 1.691$

Рисунок 5 – Определения вероятностных характеристик в Mathcad (начало)

По графику функции определяются мода экспериментального распределения и плотность вероятности моды

Мода экспериментального распределения - абсцисса максимума кривой  $\psi$  плотности распределения  $m := 0.857$

$$m := \begin{cases} m & \text{if } m < 1 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

Плотность вероятности моды экспериментального распределения - ордината максимума кривой  $\psi$  плотности распределения  $cm := 0.136$

$$\sigma^2 := \alpha_2 - \alpha_1^2 \quad \sigma^2 = 0.098$$

$$A := \frac{\alpha_3 - 3 \cdot \alpha_1 \cdot \alpha_2 + 2 \cdot \alpha_1^3}{(\alpha_2 - \alpha_1^2)^{1.5}} \quad A = 0.627$$

$$\varepsilon := \frac{\alpha_4 - 4 \cdot \alpha_3 \cdot \alpha_1 + 6 \cdot \alpha_2 \cdot \alpha_1^2 - 3 \cdot \alpha_1^4}{(\alpha_2 - \alpha_1^2)^2} \quad \varepsilon = 3.503$$

Рисунок 6 – Определения вероятностных характеристик в Mathcad (окончание)

**Вычисление значений критерия Пекле**

$$Pe_1 := \begin{cases} \frac{1}{\alpha_1 - 1} & \text{if } \alpha_1 > 1.001 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad Pe_1 = 0$$

$$x_1 := 1 \quad x_2 := 1 \quad x_3 := 1$$

$$Pe_2 := \left| \text{root} \left( \alpha_2 - 1 - \frac{4}{x_1} - \frac{4}{x_1^2}, x_1 \right) \right| \quad Pe_2 = 43.227$$

$$Pe_3 := \left| \text{root} \left( \alpha_3 - 1 - \frac{9}{x_2} - \frac{30}{x_2^2} - \frac{30}{x_2^3}, x_2 \right) \right| \quad Pe_3 = 32.323$$

$$Pe_4 := \left| \text{root} \left( \alpha_4 - 1 - \frac{16}{x_3} - \frac{108}{x_3^2} - \frac{336}{x_3^3} - \frac{336}{x_3^4}, x_3 \right) \right| \quad Pe_4 = 29.125$$

$$Pe_5 := 2 \cdot \frac{m}{1 - m} \quad Pe_5 := \begin{cases} Pe_5 & \text{if } m < 1 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

$$Pe_5 = 11.986$$

Рисунок 7 – Вычисление значений Пекле в Mathcad

$$a1(x) := \operatorname{erfc}\left[\frac{1+x}{(2+x)^{0.5}}\right] \quad a2(x) := \left(\frac{2+x}{\pi}\right)^{0.5} \quad a3(x) := \exp\left(\frac{-1}{2+x}\right)$$

$$a4(x) := \frac{x}{2} \cdot \left[ \left(1+x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6}\right) \cdot a1(x) + \frac{x^4}{24} \cdot a1(x) + \frac{x^5}{120} \cdot a1(x) \right]$$

$$a(x) := (a2(x) \cdot a3(x)) - a4(x)$$

$$x := 1$$

$$Pe_6 := \left| \operatorname{root}(cm - a(x), x) \right| \quad Pe_6 = 2.105$$

$$Pe_7 := \left| \operatorname{root}\left(\alpha 2 - \frac{2}{x} - \frac{3}{x^2}, x\right) \right| \quad Pe_7 = 21.779$$

$$Pe_8 := \left| \operatorname{root}\left[A - \frac{20 + 12 \cdot x}{(3 + 2 \cdot x)^{1.5}}, x\right] \right| \quad Pe_8 = 44.548$$

$$Pe_9 := \left| \operatorname{root}\left[s - \frac{210 + 120 \cdot x}{(3 + 2 \cdot x)^2}, x\right] \right| \quad Pe_9 = 7.308$$

$$Pesr9 := \begin{cases} n9 \leftarrow 9 \\ n9 \leftarrow n9 - 1 \text{ if } Pe_1 = 0 \\ n9 \leftarrow n9 - 1 \text{ if } Pe_5 = 0 \\ \frac{1}{n9} \cdot \sum_{i=1}^{n9} Pe_i \end{cases}$$

$$Pesr4 := \begin{cases} n4 \leftarrow 4 \\ n4 \leftarrow n4 - 1 \text{ if } Pe_1 = 0 \\ n4 \leftarrow n4 - 1 \text{ if } Pe_5 = 0 \\ \frac{1}{n4} \cdot (Pe_1 + Pe_2 + Pe_5 + Pe_7) \end{cases}$$

$$Pesr9 = 23.137$$

$$Pesr4 = 25.664$$

$$Dsr9 := v \cdot \frac{L}{Pesr9}$$

$$Dsr4 := v \cdot \frac{L}{Pesr4}$$

$$Dsr9 = 0.556$$

$$Dsr4 = 0.501$$

Определение числа ячеек по вероятностным характеристикам

$$n1 := \frac{Pesr9}{2} \quad n1 = 11.568$$

$$n2 := \frac{Pesr4}{2} \quad n2 = 12.832$$

Рисунок 8 – Вычисление значений Пекле и определение числа ячеек для ячеечной модели в Mathcad

### 3.1 Моделирование процесса изменения концентрации индикатора в аппарате при импульсном возмущении на основе ячеечной модели

Первый способ решения сформулированного выше дифференциального уравнения в частных производных предполагает для проверки адекватности модели перейти к ячеечной модели. Эта модель схематически представляет реальный аппарат как некоторое число  $n$  одинаковых последовательно соединенных аппаратов (ячеек) идеального смешения (рисунок 9). Суммарный объем всех ячеек равен объему реального аппарата, следовательно, объем каждой ячейки равен  $V/n$ . Число ячеек – единственный параметр ячеечной модели.

Ячеечную модель очень удобно использовать для моделирования динамических режимов химических реакторов. Она рассматривается как модель для описания промежуточного режима между режимом идеального смешения и режимом идеального вытеснения.

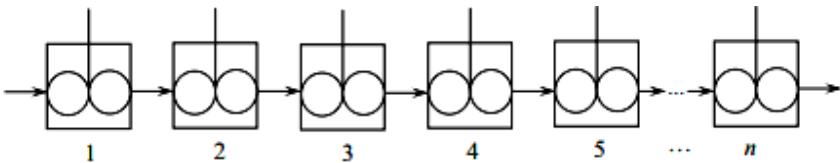


Рисунок 9 – Схема ячеечной модели (1, 2, ...,  $n$  – номера ячеек)

Математическое описание таких процессов можно представить в следующем виде:

Для 1-го реактора:

$$\frac{dC}{dt} = \frac{1}{\tau} (C_{\text{вход}} - C_i)$$

Для  $i$ -го реактора:

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

Для последнего  $n$ -го реактора

$$\frac{dC_n}{dt} = \frac{1}{\tau} (C_n - C_i)$$

$n$  – количество аппаратов, число ячеек.

Начальные условия: при  $t = 0$   $C_1 = C_{инд,1}$ ,  $C_k = 0 \forall k = 2, 3, \dots, n$

Граничные условия:  $C_{вход} = C_{вход,инд} = 0$

Число ячеек  $n$  отражает степень перемешивания в аппарате и, следовательно, его роль в ячейечной модели аналогична критерию Пекле в диффузионной модели. При определении числа ячеек в ряде случаев, при большом числе ячеек в ячейечной модели, можно воспользоваться формальной зависимостью между числом Пекле  $Pe$  и величиной  $n$ :  $n \approx \frac{Pe}{2}$ . По этой зависимости можно вычислить  $n$  и вместо диффузионной модели применить в исследованиях ячейечную модель. При этом следует учитывать, что указанные модели подходят к описанию продольного перемешивания потока с разных физических позиций, поэтому полной идентичности при пересчете  $Pe$  в  $n$  и обратно ожидать нельзя.

Примерный расчет для рассматриваемого примера дает значение  $n$  по среднему из девяти значений числа Пекле:  $n_1 = \frac{Pe_{sr9}}{2} \cong 12$  и по среднему из четырех значений числа Пекле:  $n_2 = \frac{Pe_{sr4}}{2} \cong 13$

**Второй способ.** Для определения числа ячеек можно также воспользоваться известным из литературы [3] значением отклика в статике ячейечной модели на импульсное возмущение:

$$C_n = C_{выходн} \cdot \frac{1}{(n-1)!} \cdot \left(\frac{t \cdot n}{\tau}\right)^{n-1} \cdot \exp\left(-\frac{t \cdot n}{\tau}\right),$$

где  $C_{входн}$ ,  $C_n$  – концентрации индикатора на входе и выходе из аппарата.

Определение числа ячеек этим способом представлено на рисунке 10.

Решение задачи осуществляется в блоке оптимизации программного продукта Mathcad с помощью функции *Minimize* [4]. В качестве критерия оптимизации используется суммарное квадратичное отклонение экспериментальных данных  $t_i$  и  $C_{инд_i}$  от



расчетных. Расчетные значения получаются по приведенному выше уравнению отклика ячеечной модели на импульсное возмущение.

**Третий способ.** Приближенное определение числа ячеек по вероятностным характеристикам [2] показано на рисунках 11, 12. При расчете моментов по экспериментальным кривым используется ступенчатая аппроксимация, т.е. безразмерный начальный момент  $i$ -го порядка вычисляется по формуле:

$$M_i = \sum_{i=1}^{N-1} \theta_i Csr_i \Delta \theta,$$

где  $\theta_i$  – безразмерное время,  
 $Csr_i$  – среднее значение концентрации внутри каждого интервала  $\Delta \theta$ .

Рассмотрим нахождение решений по ячеечной модели и выводы о ее адекватности [5]. Остановимся для общего случая на системе из десяти реакторов – десяти дифференциальных уравнений с десятью неизвестными, при этом будем учитывать только значения концентраций на выходе из последней ячейки. Результаты моделирования приведены ниже в протоколах решения задачи (рисунки 13, 14).

**Метод определения  $n$  и  $Cvход$  по экспериментальным данным**

**Задание начальных приближений  $n$  и  $Cvход$**

$n := 5$        $Cvход := 10$

$$S(n, Cvход) := \sum_{i=1}^N \left[ Cind_i - Cvход \cdot \left[ \frac{1}{(cell(n) - 1)!} \cdot \left( \frac{t_i}{\tau} \right)^{cell(n)-1} \cdot \exp\left(-\frac{t_i}{\tau}\right) \right] \right]^2$$

**Обращение к процедуре оптимизации Minimize для вычисления  $n$  и  $Cvход$**

$$\begin{pmatrix} n \\ Cvход \end{pmatrix} := \text{Minimize}(S, n, Cvход)$$

**Полученные значения  $n$  и  $Cvход$**

$cell(n) = 10$

$Cvход = 66.02$

Рисунок 10 – Определение числа ячеек и входной концентрации индикатора с помощью Mathcad

**Упрощенное определение числа ячеек по вероятностным характеристикам**

**Вычисление среднего времени пребывания**

$$\tau_1 := \frac{\sum_{i=1}^N (t_i \cdot C_{ind_i})}{\sum_{i=1}^N C_{ind_i}} \quad \tau_1 = 2.329$$

$$\Delta t := 0.25 \quad \Delta \theta := \frac{\Delta t}{\tau_1} \quad \Delta \theta = 0.107$$

$$i := 1..N - 1$$

$$C_{sf_i} := \frac{\psi_{i-1} - \psi_i}{2} + \psi_i$$

**Csf<sub>i</sub> =**

3.17018 10 <sup>-6</sup>
1.43068 10 <sup>-4</sup>
2.7538 10 <sup>-3</sup>
0.01049
0.03197
0.06836
0.10328
0.12628
0.13312
0.12539
0.10424
0.08065
0.05975
0.04052
0.02791
0.01612
9.88299 10 <sup>-3</sup>

Рисунок 11 – Листинг программы Mathcad для вычисления числа ячеек по вероятностным характеристикам (начало)

### Вычисление нулевого момента

$$M0 := \sum_{i=1}^{N-1} (\Delta\theta \cdot Csr_i) \quad M0 = 0.102$$

$$M1 := \sum_{i=1}^{N-1} (\theta_i \cdot Csr_i \cdot \Delta\theta) \quad M1 = 0.097$$

### Вычисление второго момента безразмерной $C\theta_i$ -кривой

$$M2 := \left[ \sum_{i=1}^{N-1} [(\theta_i)^2 \cdot Csr_i \cdot \Delta\theta] \right] \quad M2 = 0.102$$

$$M1m := \frac{M1}{M0} \quad M1m = 0.945$$

$$M2m := \frac{M2}{M0} \quad M2m = 0.993$$

$$M2t := \frac{M2m}{M1m^2} \quad M2t = 1.113$$

$$Pe := \frac{2}{M2t - 1} \quad Pe = 17.701$$

$$n := \frac{1}{M2t - 1} \quad n = 8.851$$

Рисунок 12 – Листинг программы Mathcad для вычисления числа ячеек по вероятностным характеристикам (окончание)

**Моделирование процесса по ячеечной модели при импульсном возмущении концентрации индикатора**

$$i := 1..10 \quad N1 := 10 \quad n_i := 0$$

$$k := 1..N1 \quad n_k := 1 \quad \tau := \frac{\tau}{N1} \quad \tau = 0.233$$

$$C := \begin{pmatrix} \text{Cvxod} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$D(tt, C) := \begin{pmatrix} -\frac{n_1}{\tau} \cdot C_1 \\ \frac{n_2}{\tau} \cdot (C_1 - C_2) \\ \frac{n_3}{\tau} \cdot (C_2 - C_3) \\ \frac{n_4}{\tau} \cdot (C_3 - C_4) \\ \frac{n_5}{\tau} \cdot (C_4 - C_5) \\ \frac{n_6}{\tau} \cdot (C_5 - C_6) \\ \frac{n_7}{\tau} \cdot (C_6 - C_7) \\ \frac{n_8}{\tau} \cdot (C_7 - C_8) \\ \frac{n_9}{\tau} \cdot (C_8 - C_9) \\ \frac{n_{10}}{\tau} \cdot (C_9 - C_{10}) \end{pmatrix}$$

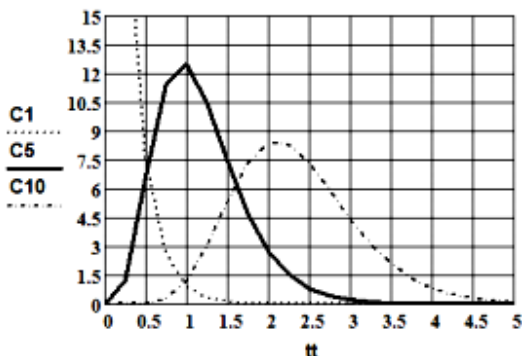
**Правые части  
дифференциальных  
уравнений**

$$z := \text{Rkadapt}(C, 0, 30, 120, D)$$

Рисунок 13 – Листинг программы моделирования в Mathcad по ячеечной модели для системы из десяти реакторов

$$C6 := z^{(7)} \quad C7 := z^{(8)} \quad C8 := z^{(9)} \quad C9 := z^{(10)} \quad C10 := z^{(11)}$$

Результаты моделирования по уравнениям математического описания для ячеечной модели



Результаты моделирования по известному из литературы решению

$$n := 10$$

$$c(t1, n) := C_{\text{вход}} \cdot \frac{1}{(n-1)!} \cdot \left(\frac{t1}{\tau}\right)^{n-1} \cdot \exp\left(\frac{-t1}{\tau}\right)$$

$$t1 := 0, 0.05.. 8$$

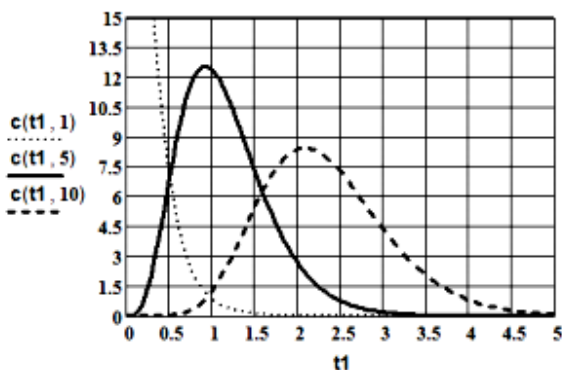


Рисунок 14 – Результаты моделирования в Mathcad по ячеечной модели при разном количестве ячеек модели

Сравнение полученных результатов на рисунке 15 позволяет сделать вывод, что ячеечная модель из десяти реакторов может с

достаточной точностью описывать реактор вытеснения длиной 30 метров и при заданных исходных данных.

### Сравнение результатов моделирования

$C_{10}$  - значение концентрации на выходе 10-го реактора, полученное при решении по уравнениям математического описания ячеечной модели

$C_{ind}$  - экспериментальное значение

$c(t_1, 10)$  - результаты моделирования по известному из литературы решению

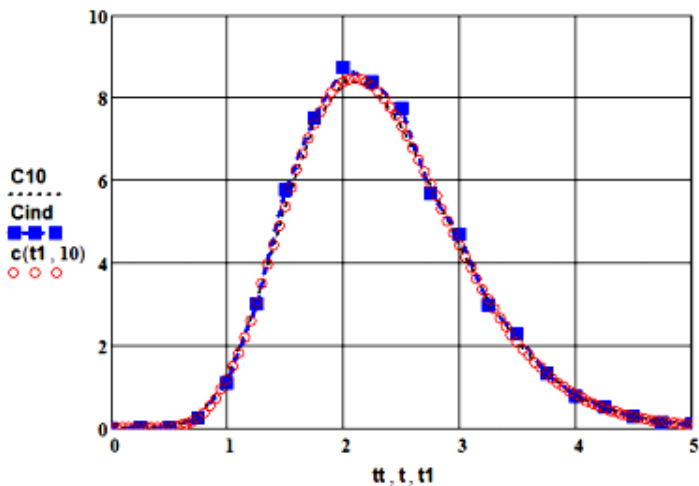


Рисунок 15 – Сравнение в Mathcad расчетных и экспериментальных данных (квадратные точки с пунктирной линией)

## ВЫВОДЫ

1. Рассмотренные методы математического моделирования структуры потоков в аппаратах химической технологии основаны либо на определении коэффициента продольного перемешивания, либо на определении числа ячеек для ячеечной модели.

2. Определение коэффициента продольного перемешивания возможно двумя методами:

- использование формул (1)-(18) для вычисления значения критерия Пекле по экспериментальной дифференциальной функции распределения;

- вычисление значения критерия Пекле на основе аналитического решения обратной задачи для дифференциального уравнения в частных производных по уравнениям (19)-(20).

3. Значение коэффициента продольного перемешивания определяется по формуле:  $D = v \cdot L / Pe_{cp}$ .

4. Для определения числа ячеек существуют следующие возможности:

- использование формальной зависимости между числом Пекле и величиной  $n$ :  $n \approx \frac{Pe}{2}$

- приближенное определение числа ячеек по вероятностным характеристикам;

- решение обратной задачи с использованием уравнения отклика ячеечной модели на импульсное возмущение.

### **Отчет о выполненной работе должен содержать:**

1. Схему установки для экспериментального определения кривой дифференциальной функции распределения.
2. Математическое описание кривой дифференциальной функции распределения среднего времени пребывания.
3. Алгоритм решения уравнений математического описания дифференциальной функции распределения.
4. Экспериментальная кривая дифференциальной функции распределения, условия опыта, при которых она получена и массивы чисел.
5. Результаты расчета коэффициента продольного перемешивания.
6. Определение числа ячеек в ячейочной модели и результаты моделирования ячейочной модели при соответствующем числе ячеек.
7. Выводы по работе.

### **КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ**

1. Какие аппаратурно-технологические параметры влияют на величину коэффициента продольного перемешивания?
2. Почему распределение времени пребывания вещества в проточном аппарате можно рассматривать как случайную величину?
3. Что такое начальные моменты  $n$ -го порядка и как их определить по экспериментальной кривой дифференциальной функции распределения?
4. Что такое мода и плотность вероятности моды?
5. Что такое центральные моменты  $n$ -го порядка и как их определить по экспериментальной кривой дифференциальной функции распределения?
6. Чему равна дисперсия распределения времени пребывания и что она характеризует?
7. Чему равны показатели асимметрии и эксцесса?



8. Из решения уравнений какой модели находятся уравнения связи вероятностных характеристик с критериями Пекле для модели продольного перемешивания?

9. Почему значения критерия Пекле, найденные из уравнений связи для различных вероятностных характеристик, неоднозначно характеризуют степень продольного перемешивания потока в аппарате?

10. К каким значениям стремятся величины вероятностных характеристик при изменении критерия Пекле от 0 до  $\infty$ ?

## ЛИТЕРАТУРА

1. Безденежных А.А. Моделирование химико-технологических процессов. Гидродинамические процессы. Л.: ЛТИ, 1978. – 21 с.
2. Веригин А. Н. Федоров В. Н., Данильчук В. С. Химико-технологические агрегаты: Имитационное моделирование. – СПб.: Изд-во С.-Петербургского ун-та, 1998. – 220 с.
3. Reschetilowski W. Technisch-Chemisches Praktikum.– Weinheim.: Wiley-VCH, 2002. – 246 pp.
4. Холоднов В.А., Лебедева М.Ю. Системный анализ и принятие решений. Решение задач оптимизации химико-технологических систем в среде Mathcad и Excel. СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2006. – 219 с.
5. Холоднов В.А., Дьяконов В.П., Иванова Е.Н., Кирьянова Л.С. Математическое моделирование и оптимизация химико-технологических процессов: Практическое руководство. СПб.: АНО НПО «Профессионал», 2003. – 480 с.

**Белоглазов Илья Ильич**

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ И ОБЪЕКТОВ В  
ХИМИЧЕСКИХ ТЕХНО-ЛОГИЯХ**

*Методические указания к курсовой работе.*

Ответственный редактор *Е. Мартынова*

Корректор *А. Федоров*

Компьютерная верстка и обложка *Д. Моисеев*

Сдано в набор 22.04.2015

Подписано печати 23.04.2015

Формат 60x90/16

Печ. л. 2,18

Тираж 100 экз.

Заказ 22-04-15

Издательство «Art-Xpress»

19915, Санкт-Петербург, Уральская, 17

Тел: +7(812) 331-33-22, (812) 622-06-44

E-mail: [zakaz@art-xpress.ru](mailto:zakaz@art-xpress.ru)

[www.art-xpress.ru](http://www.art-xpress.ru)

Лицензия № 065 684 от 19.02.98 г.

Отпечатано в «Art-Xpress»

19915, Санкт-Петербург, Уральская, 17

