

# МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПРОЦЕССОВ ОЧИСТКИ ДЫМОВЫХ ГАЗОВ

Н.Р.Юсупбеков, Н.Х.Бобомуродов

Узбекистан, Ташкент

Конструирование математических моделей носит итерационный характер. Каждый параметр имеет свою функцию принадлежности, вид которой определяется или результатом статической обработки данных динамической базы и архива SCDA-системы или итерационной процедурой достижения заданной меры близости.

Связи между параметрами выражается матрицей отношений или обобщенной многомерной функций принадлежности.

При проектировании контактных аппаратов с неподвижным слоем катализатора большое значение приобретают вопросы равномерного подвода реагирующих веществ, смешения потоков на входе в реакционный объем, нагрева и охлаждения слоя катализатора и т.д.

Исследование математических моделей открывает возможность определить эффективные условия работы реактора, установить требования, ограничивающие отклонения от однородных условий в допустимых пределах.

При решении таких проблем, как моделирование процессов, протекающих на катализаторе с изменяющейся во времени активностью, оптимальный пуск и останов реактора, переходные режимы в слое и на зерне катализатора, управление реактором в устойчивом и неустойчивом режимах, необходимо знать динамические свойства реактора, которые могут быть определены на основе глубокого изучения процессов протекающих в нестационарном режиме.

Если внутри зерна катализатора имеются незначительные градиенты температуры, то математическое описание нестационарного процесса тепло- и массообмена при протекании экзотермической реакции можно представить системой уравнений.

$$\begin{aligned} \varepsilon \frac{\partial T}{\partial t} &= \frac{\lambda_L}{C_p} \frac{\partial^2 T}{\partial l^2} + \frac{\lambda_r}{C_p} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial T}{\partial r} \right) - u \frac{\partial T}{\partial l} - \frac{\alpha}{C_p} (T - \theta) \\ \frac{C_{cs}}{C_p} \frac{\partial \theta}{\partial t} &= \frac{\lambda_{ck}}{C_p} \frac{\partial^2 \theta}{\partial l^2} + \frac{\lambda_{rk}}{C_p} \left( r \frac{\partial \theta}{\partial r} \right) + \\ &+ \frac{\alpha}{C_p} (T - \theta) + \Delta T_{ad} \cdot W(Y, \theta) \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon \frac{\partial X}{\partial t} &= D_L \frac{\partial^2 X}{\partial l^2} + D_r \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial X}{\partial r} \right) - \\ &- u \frac{\partial X}{\partial l} - \beta(X - Y) \end{aligned}$$

$$\varepsilon_1 \frac{\partial Y}{\partial t} = \beta(X - Y) + W(Y, \theta)$$

$$r \in (0, R), \quad (l, t) \in (0, L) \times (0, t_k)$$

где  $r, l$  - пространственные переменные,

$t$  - время,  $t_k$  - конечный момент времени,

$T, \theta$  - температуры газового потока и скелета слоя катализатора,

$X, Y$  - степени превращения в потоке и в слое катализатора,

$D_L, \lambda_L$  - коэффициенты продольной диффузии и теплопроводности,  
 $D_r, \lambda_r$  - коэффициенты радиальной диффузии и теплопроводности,  
 $\alpha, \beta$  - коэффициенты тепло- и массообмена,  
 $\lambda_{ск}, \lambda_{rk}$  - коэффициенты теплопроводности скелета слоя,  
 $C_p, C_{ск}$  - теплоемкость газовой смеси и слоя катализатора,  
 $\Delta T_{ад}$  - адиабатический разогрев,  
 $W(Y, \theta)$  - скорость реакции,  
 $\varepsilon_1 = \varepsilon_s(1 - \varepsilon), \varepsilon$  - пористость слоя,  $\varepsilon_s$  - пористость зерна,  
 $u = u(t)$  - скорость газового потока.

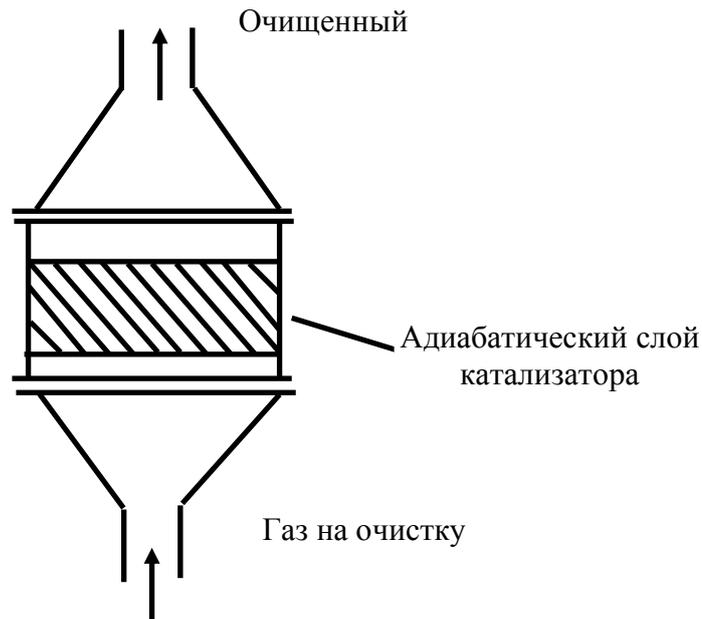


Рис.1. Схема контактного аппарата

Начальные и граничные условия для системы (1) задаются в соответствии с конкретным процессом, причем граничные условия представляют собой тепловой и материальный балансы в скелете слоя катализатора.

В контактном аппарате (см. рис.1) происходит очистка дымовых газов от диоксида серы путем каталитического окисления.

Особенностью этого процесса является то, что состав и температура реагирующей газовой смеси на входе в аппарат не являются постоянными, а существенно изменяются во времени.

Контактный аппарат работает в двух режимах: стационарном и нестационарном.

Стационарный режим является преимущественным, но математическое моделирование переходных нестационарных режимов является очень важным для обеспечения эффективной и стабильной работы химического реактора.

Переходным режимам в адиабатическом слое катализатора соответствует нестационарный процесс тепло- и массообмена при протекании экзотермической реакции, который описывается следующей системой уравнений:

$$\varepsilon \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\lambda_L \partial^2 T}{C_p \partial l^2} - u \frac{\partial T}{\partial l} - \frac{\alpha}{C_p} (T - \theta)$$

$$\frac{C_{ca} \partial \theta}{C_p \partial t} = \frac{\lambda_{ck} \partial^2 \theta}{C_p \partial l^2} + \frac{\alpha}{C_p} (T - \theta) + \Delta T_{ad} \cdot W(Y, \theta) \quad (2)$$

$$\varepsilon \frac{\partial X}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 X}{\partial l^2} + D_r \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial X}{\partial r} \right) - u \frac{\partial X}{\partial l} - \beta(X - Y)$$

$$\varepsilon_1 \frac{\partial Y}{\partial t} = \beta(X - Y) + W(Y, \theta)$$

$$t_k < +\infty$$

$r \in (0, R), (l, t) \in Q = (0, L) \times (0, t_k)$ , с начальными и граничными условиями

$$t = 0: T(l) = T_0, \theta(l) = \theta_0, \quad (3)$$

Двухфазная модель (2)-(4) отражает реальный процесс в реакторе с адиабатическим слоем катализатора при следующих допущениях:

$l = 0$ :

$$\lambda_L \frac{\partial T}{\partial l} = u \cdot C_p (T - T_1),$$

$$\lambda_{ck} \frac{\partial \theta}{\partial l} = \alpha(\theta - T_1)$$

$$D_L \frac{\partial X}{\partial l} = u \cdot (X - X_1), t \in (0, t_k).$$

$$l = L: \frac{\partial T}{\partial l} = 0, \frac{\partial X}{\partial l} = 0,$$

$$-\lambda_{ck} \frac{\partial \theta}{\partial l} = \alpha(\theta - T_1), t \in (0, t_k). \quad (4)$$

- 1) Перепады давления по слою невелики по сравнению с общим давлением, так что считаем давление постоянным;
- 2) Равновесие между состоянием катализатора, а также концентрацией промежуточных веществ на его внутренней поверхности и состоянием газовой фазы наступает практически мгновенно.

Математическая модель учитывает процессы конвективного переноса тепла и вещества в газовой фазе и обмен со слоем катализатора.

Например, реакции первого порядка показано, что переходные режимы в слое практически не чувствительны к интенсивности тепловыделения внутри зерна.

Для таких процессов можно пользоваться квазигомогенной моделью.

В стационарном режиме градиенты температуры и степени превращения намного меньше, чем в нестационарном. Поэтому допустимо использовать квазигомогенную модель.