

МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В ПРОТИВОТОЧНЫХ РЕАКТОРАХ НА ПРИМЕРЕ ВОССТАНОВЛЕНИЯ ЖЕЛЕЗА

Л. Р. Назмутдинова

Башкирский государственный университет, Уфа

Аннотация. Рассматривается модель восстановления железа в противоточных реакторах в различных режимах. Получены параметры обеспечивающие оптимальный выход конечного продукта.

Ключевые слова: противоточные реакторы, моделирование, нелинейные системы уравнений

С практической точки зрения представляет большой интерес изучение работы химических реакторов в стационарном и периодическом режимах. В качестве приложения в работе изучаются гиперболические задачи, описывающие процесс восстановления железа из окислов в противоточном химическом реакторе [1].

Математическая модель этого процесса имеет вид:

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} - \frac{\partial u_1}{\partial x} = -r_1(u_1, v), \quad (1)$$

$$\frac{\partial u_2}{\partial t} - \frac{\partial u_2}{\partial x} = -r_2(u_2, v) + r_1(u_1, v), \quad (2)$$

$$\frac{\partial u_{n-1}}{\partial t} - \frac{\partial u_{n-1}}{\partial x} = -r_{n-1}(u_{n-1}, v) + r_{n-2}(u_{n-2}, v), \quad (3)$$

$$\frac{\partial u_n}{\partial t} - \frac{\partial u_n}{\partial x} = +r_{n-1}(u_{n-1}, v), \quad (4)$$

$$A \frac{\partial v}{\partial t} + S \frac{\partial v}{\partial x} = - \sum_{i=1}^{n-1} \Delta_i r_i(u_i, v), \quad (5)$$

Граничные и начальные условия

$$v(0, t) = v_0, \quad u_i(1, t) = u_{i1}, \quad i = 1, \dots, n, \quad (6)$$

$$v(x, 0) = v^0(x) \geq 0, \quad u_i(x, 0) = u_i^0(x) \geq 0, \quad i = 1, \dots, n. \quad (7)$$

Здесь $t \geq 0$ — безразмерное время; $0 \leq x \leq 1$ — безразмерная координата длины реактора; $u_i(x, t)$, $v(x, t)$ — концентрация оксидов железа и СО соответственно. Функции $r_i(u_i, v)$ определяют скорости химических превращений веществ.

Параметры A , S , Δ_i , v_0 , u_{i1} и начальные данные $v^0(x)$, $u_i^0(x)$ удовлетворяют естественным ограничениям

$$0 < A, S, \Delta_i; \quad 0 \leq v_0, u_{i1}; \quad 0 \leq v_0 \leq 1; \quad (8)$$

$$\sum_{i=1}^n u_{i1} = 1; \quad 0 \leq v^0(x) \leq 1; \quad 0 \leq u_i^0(x) \leq 1; \quad \sum_{i=1}^n u_i(x) \equiv 1. \quad (9)$$

Используя априорные оценки решений, доказывается теорема существования классических решений задачи (1)–(7) для достаточно гладких начальных данных, удовлетворяющих условиям согласования нулевого и первого порядков [2]. Далее исследуется вопрос о существовании и числе стационарных решений этой задачи. Проведенные расчеты нестационарной модели в реальной области параметров показали, что стационарное решение является устойчивым. Поэтому его можно искать численно методом стабилизации.

На Рис. 1–2 приведены расчеты нестационарной задачи (1)–(7) с начальными данными $v^0(x) \equiv 1 - x/2$, $u_1^0(x) \equiv 0.9 - x/2$, $u_2^0(x) \equiv 0.1 + x/2$, $u_3^0(x) \equiv 0$. Видно, что при $t \rightarrow \infty$ решения стабилизируются к одному и тому же стационарному режиму, который не зависит от параметра A . Приведем численные результаты для модели (1)–(7), где $r_i(u_i, v) = f_i(u_i)g_i(v - v_i) = K_i u_i g(v - v_i)$, $i = 1, 2, 3$; $v_1 < v_2 < \dots < v_{n-1}$ — положительные числа такие, что $g_i(v - v_i) = 0$ при $v \leq v_i$ и $g_i(v - v_i) > 0$ при $v > v_i$, $i = 1, 2, 3$:

$$g(\xi) = \begin{cases} \xi, & \xi > 0; \\ 0, & \xi \leq 0. \end{cases} \quad (10)$$

Значения варьируемых параметров задаются на рисунках, а постоянные параметры задачи при расчетах определены как $\Delta_1 = 0.17$, $\Delta_2 = 0.28$, $\Delta_3 = 1.05$, $v_0 = 1$, $v_1 = 0.01$, $v_2 = 0.22$, $v_3 = 0.715$.

Рис. 1–5 демонстрируется процесс стабилизации (выход на стационарный режим) нестационарных решений при $t = \infty$. Видно, что изменения стационарных концентраций $u_i(x, t)$, $v(x, t)$ происходят в основном на концах реактора $x = 0$ и $x = 1$, а при $0 < \epsilon \leq x \leq 1 - \epsilon$ практически не меняются по длине реактора. Это означает, что реактор может не работать эффективно во всех стационарных режимах по всей длине. Поэтому была проведена численная параметрическая оптимизация стационарных решений с целью увеличения концентрации чистого железа $u_n(0) = 1 - \sum_{i=1}^{n-1} u_i(0)$

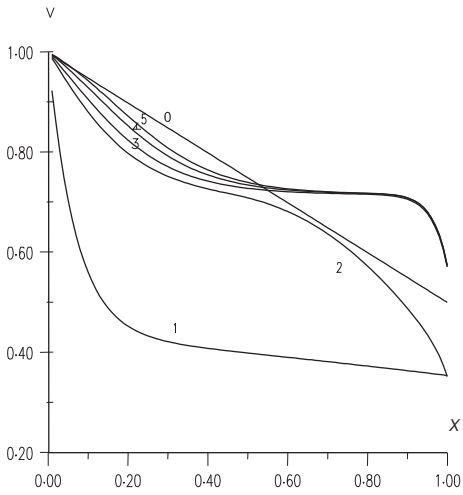


Рис. 1. Стабилизация нестационарных решений t к стационарным решениям. Профили концентраций CO ($v(x, t)$) при 0) $t = 0$; 1) $t = 0.0005$; 2) $t = 0.2$; 3) $t = 0.4$; 4) $t = 0.6$; 5) $t = \infty$

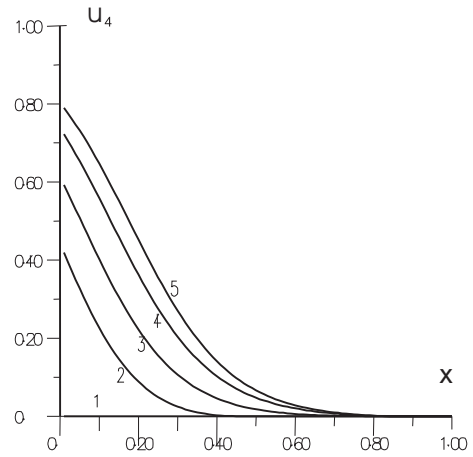


Рис. 2. Стабилизация нестационарных решений t к стационарным решениям. Профили концентраций Fe ($u_4(x, t)$) при 1) $t = 0.0005$; 2) $t = 0.2$; 3) $t = 0.4$; 4) $t = 0.6$; 5) $t = \infty$

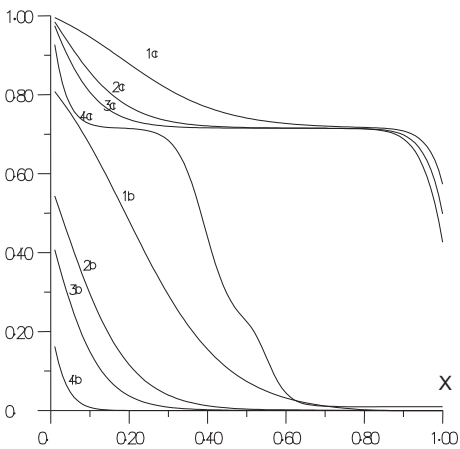


Рис. 3. Стационарные профили для CO(a) и Fe(b) при 1) $S = 3$; 2) $S = 2$; 3) $S = 1.5$; 4) $S = 0.6$

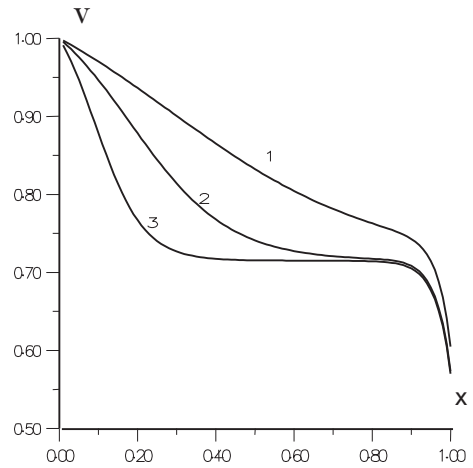


Рис. 4. Стационарные профили для CO при 1) $K_3 = 10$; 2) $K_3 = 23$; 3) $K_3 = 50$

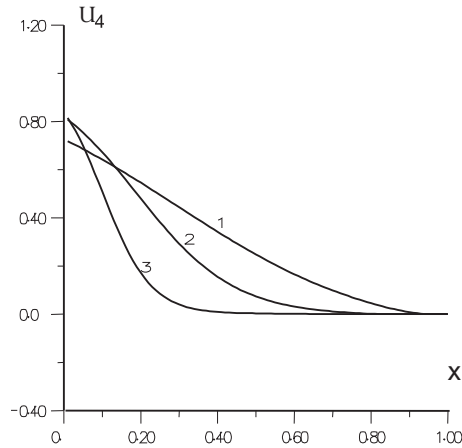


Рис. 5. Стационарные профили для Fe при 1) $K_3 = 10$; 2) $K_3 = 23$; 3) $K_3 = 50$

на выходе $x = 0$ и уменьшения концентрации CO на выходе из реактора $x = 1$ за счет изменения параметров S (отношения скоростей потоков газовой и твердой фазы), A (отношения плотностей потоков газовой и твердой фазы). Также менялись параметры K_i при скоростях стадий химических реакций и входные концентрации u_{i1} , что соответствует выбору различных температурных режимов и предварительной подготовке пропорций окислов железа при подаче в реактор.

Сравнение рисунков показывает, что удастся существенно увеличить стационарную концентрацию железа на выходе (уменьшить $u_i(0)$, $i = 1, \dots, n - 1$) путем увеличения K_{n-1}, S . На уменьшение стационарной концентрации CO $v(1)$ на выходе влияет увеличение K_3 и концентраций u_{21}, u_{31} . Однако существенного уменьшения $v(1)$ не удастся достичь без потери (уменьшения) выхода чистого железа путем численной параметрической оптимизации на модели. Численные результаты наглядно демонстрируют возможности математического моделирования в нахождении области параметров моделей, дающих с определенной долей достоверности «выгодные» на практике режимы реальных процессов.

Список литературы

- [1] Moravec P., Akramov T. A., Stanek V. A mathematical model as a tool the rating of gas-solid reactions with special reference to iron ore reduction // Proc. of 9th International congress CHISA-87, Praha, 1987.
- [2] Акрамов Т. А. Дифференциальные уравнения и их приложение в моделировании физико-химических процессов. Уфа: Изд-во БашГУ. 2000. 200 с.