



# 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  $A$ ,  $S$ ,  $\Delta_i$ ,  $v_0$ ,  $u_{i1}$  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  $u_n(0) = 1 - \sum_{i=1}^{n-1} u_i(0)$

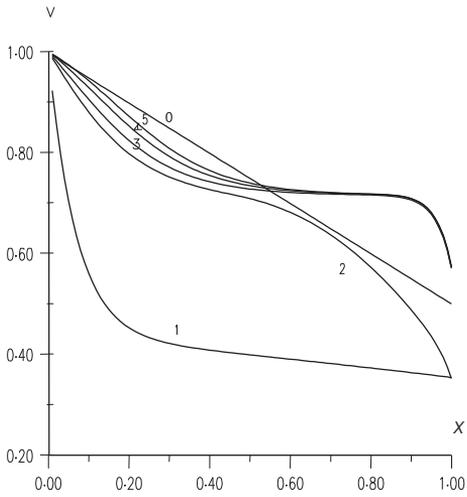


Рис. 1. Стабилизация нестационарных решений  $t$  к стационарным решениям. Профили концентраций CO ( $v(x, t)$ ) при 0)  $t = 0$ ; 1)  $t = 0.0005$ ; 2)  $t = 0.2$ ; 3)  $t = 0.4$ ; 4)  $t = 0.6$ ; 5)  $t = \infty$

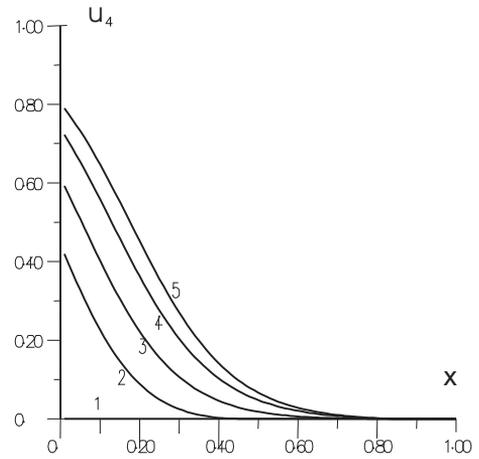


Рис. 2. Стабилизация нестационарных решений  $t$  к стационарным решениям. Профили концентраций Fe ( $u_4(x, t)$ ) при 1)  $t = 0.0005$ ; 2)  $t = 0.2$ ; 3)  $t = 0.4$ ; 4)  $t = 0.6$ ; 5)  $t = \infty$

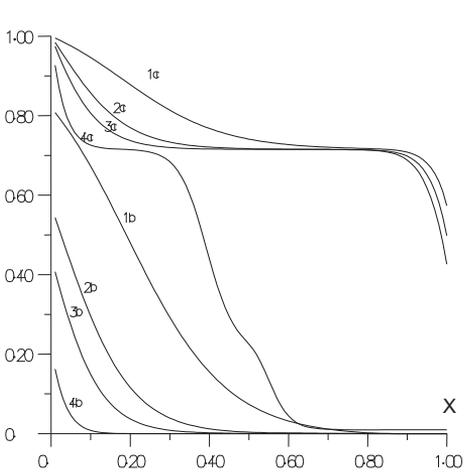


Рис. 3. Стационарные профили для CO(a) и Fe(b) при 1)  $S = 3$ ; 2)  $S = 2$ ; 3)  $S = 1.5$ ; 4)  $S = 0.6$

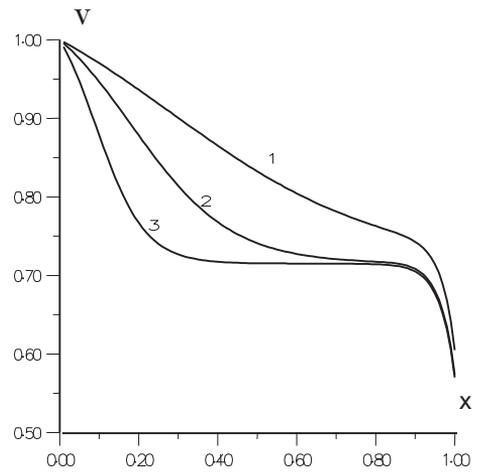


Рис. 4. Стационарные профили для CO при 1)  $K_3 = 10$ ; 2)  $K_3 = 23$ ; 3)  $K_3 = 50$

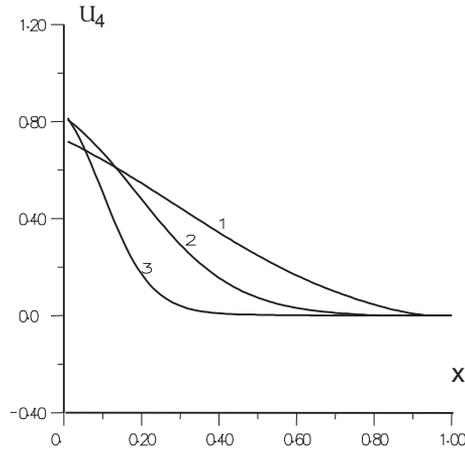


Рис. 5. Стационарные профили для Fe при 1)  $K_3 = 10$ ; 2)  $K_3 = 23$ ; 3)  $K_3 = 50$

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.