

С.В. Натареев

**Моделирование и расчет процессов  
химической технологии  
Учебное пособие**

Иваново

2008

Федеральное агентство по образованию  
Государственное образовательное учреждение  
высшего профессионального образования  
Ивановский государственный химико-технологический университет

С.В. Натареев

**МОДЕЛИРОВАНИЕ И РАСЧЕТ ПРОЦЕССОВ  
ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ**

Учебное пособие

Под редакцией В.Н. Блиничева

*Рекомендовано Учебно-методическим объединением по образованию  
в области химической технологии и биотехнологии*

Иваново 2008

УДК 519.7

Натареев, С.В. Моделирование и расчет процессов химической технологии: учебное пособие / С.В. Натареев; под. ред. В.Н. Блиничева; Иван. гос. хим.–технол. ун–т. – Иваново, 2008. – 144 с.  
ISBN 948-5-9616-0287-6

В учебном пособии рассмотрены математические модели процессов и аппаратов химической технологии и приведены примеры их расчета с помощью пакета Mathcad 13.

Предназначено для студентов специальности “Машины и аппараты химических производств”.

Табл. 2. Ил. 32. Библиогр.: 15 назв.

Печатается по решению редакционно–издательского совета Ивановского государственного химико-технологического университета

Рецензенты: доктор технических наук С.Г. Гончаров (Ярославский государственный технологический университет), Гуюмджян П.П. (Ивановский государственный архитектурно-строительный университет).

ISBN 948-5-9616-0287-6

© Натареев С.В., 2008

© Ивановский государственный  
химико–технологический  
университет, 2008

## Оглавление

Введение	5
Глава 1. Математическое моделирование химико-технологических систем	6
1.1. Основные понятия и определения	6
1.2. Составление математического описания и выбор метода его решения	6
1.3. Параметрическая идентификация и проверка адекватности математической модели	11
Глава 2. Составные части математической модели химико-технологического процесса	22
2.1. Химическое и фазовые равновесия	22
2.2. Материальный баланс	31
2.3. Тепловой баланс	37
2.4. Гидродинамика структуры потоков	39
2.5. Кинетика химико-технологических процессов	47
2.5.1. Химическая кинетика	47
2.5.2. Кинетика теплообменных процессов	52
2.5.3. Кинетика массообменных процессов	60
Глава 3. Моделирование и расчет аппаратов химических производств	67
3.1. Емкостной реактор проточного типа	67
3.2. Реактор колонного типа	70
3.3. Кожухотрубчатый подогреватель	74
3.4. Насадочный абсорбер	79
3.5. Каскад адсорберов емкостного типа с мешалками	84
3.6. Адсорбер с неподвижным слоем адсорбента	87
3.7. Ионообменная колонна с провальными тарелками	97

3.8. Сушилка с кипящим слоем	117
3.9. Кристаллизатор с псевдооживленным слоем	128
Глава 4. Обобщенное математическое описание химико— технологического процесса	139
Список литературы	143

## Введение

Дальнейшее совершенствование процессов и аппаратов химической технологии невозможно без создания современных инженерных методов их расчета. Используемые на практике методики расчета отличаются физическим обоснованием явлений, протекающих в химико-технологических системах, методологией, математическим описанием и средствами их реализации. Из числа существующих методов, наиболее точно отражающих современные знания о процессах химической технологии и достаточно полно удовлетворяющих техническим требованиям, является метод математического моделирования, основанный на совместном рассмотрении материального и теплового балансов, равновесных и кинетических закономерностей, а также особенностей переноса вещества и теплоты в рабочем объеме аппарата. Разработку математической модели целесообразно проводить на основе системного подхода [1], с помощью которого можно провести теоретическое изучение весьма сложных химико–технологических процессов, начиная с атомно–молекулярного уровня и заканчивая на уровне аппарата в целом. Однако при построении математической модели следует иметь в виду, что слишком сложные модели, учитывающие влияние многих факторов и явлений, в том числе и второстепенные, мало приемлемы. Поэтому при разработке инженерных методов расчета важно разумное сочетание необходимой сложности математической модели с физически обоснованными упрощениями, обеспечивающими заданную точность расчета.

Учебное пособие предназначено в помощь студентам для изучения метода математического моделирования и разработки на этой основе инженерных методик расчета основных процессов и аппаратов химической технологии.

# **Глава 1. Математическое моделирование химико–технологических систем**

## **1.1. Основные понятия и определения**

Процессы химической технологии весьма многообразны. Различают механические, гидромеханические, тепловые, массообменные и химические процессы. Многообразие химико-технологических процессов обуславливает разнообразие конструкций аппаратов, в которых протекают эти процессы. Совокупность взаимосвязанных процессов и аппаратов химической технологии, функционирование которых осуществляется с целью химической переработки природных материалов в продукты потребления и промежуточные продукты, образует химико-технологическую систему (ХТС). Ведущее место среди других методов исследования ХТС, особенно в связи с появлением быстродействующих ЭВМ, занимает метод математического моделирования.

Математическое моделирование – это метод научного исследования отдельных свойств ХТС с помощью математической модели, представляющей собой приближенное описание поведения объекта, выраженное с помощью математической символики.

Математическое моделирование можно подразделить на четыре этапа.

Первый этап начинается с физического описания объекта моделирования. Этот этап требует глубокого проникновения в самую сущность изучаемых явлений, детального изучения факторов, оказывающих влияние на протекающие процессы. Этап завершается составлением математического описания объекта моделирования.

Второй этап предполагает выбор метода решения системы уравнений математического описания, разработку алгоритма и его реализацию в форме моделирующей программы на ЭВМ.

Третий этап заключается в установлении адекватности разработанной модели исследуемому явлению путем сопоставления результатов теоретических исследований с данными экспериментов.

Четвертый этап состоит в проведении анализа результатов расчета, полученных с помощью разработанной математической модели, и её модернизации.

## **1.2. Составление математического описания и выбор метода его решения**

Начальным этапом при составлении математической модели является анализ равновесных закономерностей ХТС. На основе данного анализа определяют возможность осуществления процесса, предельные значения его параметров и записывают уравнение равновесного состояния ХТС.

Затем, исходя из законов сохранения массы, энергии и импульса, составляют материальный и энергетический балансы. На основе материального баланса находят количество вещества, получаемого при функционировании ХТС. В химической технологии часто ограничиваются составлением теплового баланса, который является составной частью энергетического баланса. Из теплового баланса находят тепловые нагрузки и расходы теплоносителей.

Последующим этапом при разработке математической модели является формулировка уравнения кинетики, которое устанавливает зависимость скорости протекания процесса от концентрации реагентов и продуктов. На интенсивность протекания процесса существенное влияние может оказывать перемешивание компонентов, скорость их движения и другие факторы. Изучение закономерностей движения газов, жидкостей и сыпучих материалов составляет основную задачу гидродинамики и является следующим этапом анализа ХТС, который заканчивается составлением уравнения гидродинамики (структуры потоков).



На основании данных материального и теплового балансов, равновесных и кинетических параметров процесса, гидродинамических характеристик движущихся потоков выбирают конструкцию аппарата, а затем, задаваясь линейной скоростью движения потоков, определяют основные размеры аппарата.

Представление химико–технологического процесса как сложной иерархической структуры позволяет разделить данный процесс на отдельные составные части, отражающие какую–либо сторону процесса. В соответствии с этим общая математическая постановка задачи также разбивается на ряд отдельных систем уравнений, а именно: 1) равновесия; 2) материального баланса; 3) теплового баланса; 4) кинетики; 5) гидродинамической структуры потоков.

Указанные выше уравнения должны быть дополнены начальными и граничными условиями.

Начальные условия задают состояние процесса в некоторый фиксированный момент времени, принятый за начальный.

Граничные условия задают концентрационные и температурные режимы на границе той среды, где протекает рассматриваемый процесс.

После составления системы уравнений математического описания необходимо выбрать метод их решения, позволяющий рассчитать с заданной степенью точности ход реального процесса. В теории процессов и аппаратов химической технологии для построения и изучения математических моделей используются различные аналитические и численные методы.

В простейших случаях, когда химико–технологический процесс описывается системой линейных дифференциальных уравнений с частными производными, для её решения могут быть использованы различные методы: разделения переменных Фурье, интегральных преобразований Лапласа, функции влияния (функции Грина), метод Гринберга интегральных преобразований в конечных пределах. Все перечисленные методы относятся к аналитическим методам решения краевых задач.

В соответствии с классическим методом разделения переменных Фурье решение дифференциального уравнения с заданными краевыми условиями ищется в виде произведения двух функций, одна из которых зависит только от времени, а другая – от координаты. Нахождение решения связано с разысканием собственных функций и собственных значений некоторых дифференциальных операторов и последующим разложением функций начальных условий по найденным собственным функциям.

Для решения ряда задач, например нагревания тела с внутренним источником теплоты, нагревания тела для малых и больших времен и других, применение метода разделения весьма затруднительно. В этом случае может быть эффективен метод интегральных преобразований Лапласа.

Сущность метода интегральных преобразований Лапласа состоит в замене изучаемой функции  $f(\tau)$  действительного переменного  $\tau$  ( $0 < \tau < \infty$ ), называемой оригиналом, в функцию

$$F(s) = L[f(\tau)] = \int_0^{\infty} f(\tau) e^{-s\tau} d\tau \quad (1.2.1)$$

комплексного переменного  $s = \alpha + \beta i$ . В результате интегрирования получаем функцию  $F(s)$ , которая называется Лапласовым изображением или просто изображением. При такой замене вместо дифференциального уравнения для оригинала функции получаем алгебраическое уравнение относительно изображения. Далее из алгебраического уравнения находят изображение решения данного уравнения, после чего с помощью известных соотношений по изображению восстанавливают само решение для оригинала функции. В простейших случаях используют формулу обращения:

$$f(\tau) = L^{-1}[F(s)] = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} F(s) e^{s\tau} ds. \quad (1.2.2)$$

Операции нахождения изображения по оригиналу (и наоборот) облегчаются наличием таблиц «оригинал – изображение».