

Середа С.Н.

*Муромский институт (филиал) федерального государственного образовательного учреждения высшего образования «Владимирский государственный университет имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых»
602264, г. Муром, Владимирская обл., ул. Орловская, 23
e-mail: sereda-2010@mail.ru*

К вопросу моделирования химических реакторов

Целью системного анализа химических реакторов является исследование их динамических характеристик в условиях изменения технологических параметров, в том числе решение задач оптимизации режимов работы реакторов. В общем случае модель химического реактора является совокупностью математических моделей гидродинамики, кинетики химических реакций, модели теплового режима и других частных моделей, характеризующих влияние отдельных параметров на работу реактора. Как правило, такие математические модели выражаются системой дифференциальных уравнений [1].

В качестве инструментального средства математического моделирования широко применяется программа математических расчетов Mathcad, где реализованы алгоритмы численных методов поиска решения, например, метод Рунге-Кутты решения дифференциальных уравнений. Однако на этапе построения компьютерной модели химического реактора в этой программе возникает ряд проблем, связанных с ограничениями по времени моделирования, начальных значений концентраций реагентов и спецификой представления модельной задачи, что часто вызывает необъяснимые ошибки. В данной работе рассматривается вопрос построения моделей химических реакторов в программе MATLAB Simulink, которая является универсальным средством моделирования систем любого назначения. При этом, адекватность моделей, использующих различные подходы к моделированию, определяется совпадением результатов моделирования. Важным этапом построения компьютерной модели химического реактора является идентификация параметров и типа модели [2].

Для простейшей последовательной реакции вида $A \xrightarrow{k} B$, в которой происходит преобразование исходного реагента A в продукт реакции B , (параметр k – константа скорости реакции), математическая модель кинетики химической реакции, характеризующая скорость изменения концентрации веществ выражается системой уравнений:

$$\begin{cases} \frac{dC_A}{dt} = -kC_A \\ \frac{dC_B}{dt} = kC_A \end{cases} \quad (1)$$

Используя преобразование Лапласа к уравнению (1), можно получить передаточную функцию объекта (2), которая соответствует аperiodическому звену первого порядка.

$$W(p) = \frac{C_{A0}}{1/kp+1} \quad (2)$$

где C_{A0} – начальная концентрация реагента A ; p – оператор Лапласа.

Соответствующее функция реализуется с помощью компонента Transfer Fcn библиотеки Simulink/Continuous. Кинетические кривые, построенные в Mathcad (рис.1, а) и MATLAB Simulink (рис.1, б) идентичны, что свидетельствует о корректности построенных моделей.

Следует заметить, что кинетические кривые имеют прямую аналогию с переходными характеристиками объектов управления в системах автоматики и переходными процессами в электрических цепях в режимах коммутации. Однако, в области химических технологий кинетические кривые характеризуют динамику протекания химических реакций в реакторах, что составляет основу химико-технологических процессов.

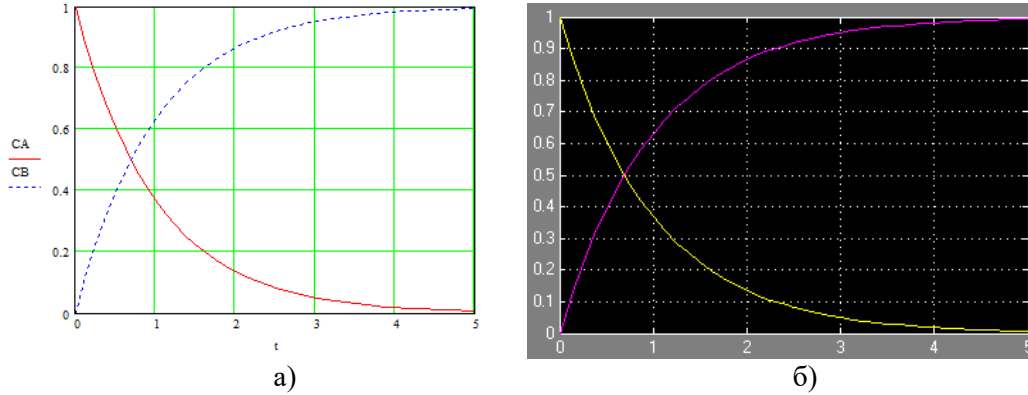


Рис.1

Для параллельной реакции вида $A \xrightarrow[k_2]{k_1} B + C$, в которой из исходного реагента А в ходе реакции образуются два продукта В и С с различными константами скорости реакции k_1 и k_2 , математическая модель кинетики химической реакции, характеризующая скорость изменения концентрации веществ выражается системой уравнений:

$$\begin{cases} \frac{dC_A}{dt} = -(k_1 + k_2)C_A \\ \frac{dC_B}{dt} = k_1 C_A \\ \frac{dC_C}{dt} = k_2 C_A \end{cases} \quad (3)$$

В этом случае в модели реактора MATLAB на выходе звена первого порядка параллельно включены два нормирующих множителя с масштабными коэффициентами $\frac{k_1}{k_1+k_2}$ и $\frac{k_2}{k_1+k_2}$.

Более сложная задача моделирования возникает для реакции, в которой участвуют два реагента вида $aA + bB \xrightarrow{k} cC$, где a, b, c – коэффициенты стехиометрического уравнения, определяющие количественные соотношения веществ. В этом случае математическая модель кинетики имеет вид

$$\begin{cases} \frac{dC_A}{dt} = -k_1 C_A^a C_B^b \\ \frac{dC_B}{dt} = -k_2 C_A^a C_B^b \\ \frac{dC_C}{dt} = k_3 C_A^a C_B^b \end{cases} \quad (4)$$

Поиск решения системы уравнений (4) в MATLAB Simulink позволил установить, что модель реактора в этом случае определяется выражением

$$C(t) = C_0 \left(\frac{1}{nt+1} \right)^m \quad (5)$$

где C_0 – начальная концентрация реагента; $C(t)$ – изменение концентрации реагента во времени; m, n – параметры модели, определяемые из исходного стехиометрического уравнения.

Например, для реакции $A + B \xrightarrow{k} C$ и одинаковых значений константы скорости реакции для реагентов А и В, получим $m=n=1$. Для реакции $2A + B \xrightarrow{k} C$ и значений $k_1=1$ и $k_2=0,5$ для реагентов А и В, получим $n=4$ и $m=0,5$. В общем случае для произвольных значений a, b, c и k_1, k_2 поиск значений m, n в уравнении модели реактора (5) представляет собой задачу оптимизации. В докладе рассматриваются модели химического реактора в MATLAB Simulink и вопросы идентификации параметров моделей.

Литература

1. Ефремов Г.И. Математическое моделирование химико-технологических процессов. – М.: ИНФРА-М, 2016. – 255 с.
2. Алексеев А.А. Идентификация и диагностика систем. – М.: Академия, 2009. – 352с.