

УДК 621.927

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛООБМЕНА МЕЖДУ ГАЗОМ И СЫПУЧИМ МАТЕРИАЛОМ С РЕАГИРУЮЩИМИ ЧАСТИЦАМИ

МИЗОНОВ В.Е., д-р техн. наук, проф., БАРАНЦЕВА Е.А., канд. техн. наук, доц. (ИГЭУ)

BERTHIAUX H., Dr.-Eng., Prof., ARLABOSSE P., Dr.-Eng., DJERROUD D., PhD student (Ecole des Mines d'Albi, France)

Предложены ячеечные математические модели теплообмена между стохастически движущимися потоками газа и сыпучего материала с химически реагирующими частицами. Модели базируются на теории цепей Маркова и позволяют численно моделировать обменные процессы без ограничений на линейность описываемых явлений. Рассмотрена задача о целенаправленном управлении кинетикой реакции по длине аппарата.

Термическая переработка сыпучих материалов широко используется в химической, строительной и других отраслях промышленности. Чаще всего она происходит в неподвижных или вращающихся трубчатых реакторах с довольно значительным отношением их длины к диаметру, что позволяет в первом приближении рассматривать потоки участвующих в процессе компонентов как одномерные. Наиболее распространенным физическим содержанием этих процессов является тепло- и массообмен между сыпучим материалом и газом, причем как в сыпучем материале, так и в газе могут протекать и химические реакции. Особенностью этих потоков является наличие более или менее выраженной стохастической составляющей движения, приводящей к дополнительному случайному переносу массы и тепла вдоль определяющей координаты процесса. Опыт предыдущих работ по моделированию процессов в дисперсных средах, результаты которых обобщены в [1-3], показал, что эффективным инструментом для этой цели является математический аппарат теории цепей Маркова и связанные с ней ячеечные модели. Ниже рассмотрен ряд аспектов приложения этой теории к моделированию движения и обменных процессов в трубчатых реакторах для переработки сыпучих материалов.

Не ограничиваясь рассмотрением равномерного распределения материала по длине реактора, представим его как последовательность ячеек разного объема (массы) $M(j)$, $j=1,2,\dots,m$, как это показано на рис.1.

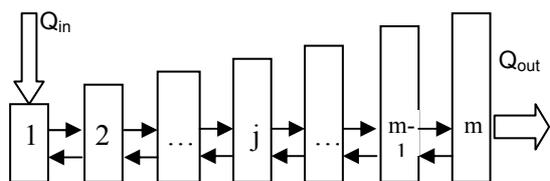


Рис.1. Схема цепи с ячейками переменного объема.

Текущее состояние процесса представлено распределением массы материала по ячейкам $m(j)$, $j=1,2,\dots,m$. Выберем продолжительность перехода между последовательными состояниями Δt настолько малой, чтобы в течение её материал мог перейти только в соседние (как вперед, так и назад) ячейки, но не далее. Направления разрешенных переходов показаны стрелками на рис.1, к которым надо присовокупить переходы из ячеек в самих себя, то есть вероятности остаться в течение Δt в ячейках.

$$P = \begin{bmatrix} 1-d-v(1) & d \frac{M(1)}{M(2)} & 0 & \dots \\ d+v(1) & 1-d-d \frac{M(1)}{M(2)}-v(2) & d \frac{M(2)}{M(3)} & \dots \\ 0 & d+v(2) & 1-d-d \frac{M(2)}{M(3)}-v(3) & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}$$

Матрица переходных вероятностей для такой цепи имеет вид

(1)

где

$$d = D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \quad (2)$$

- безразмерный, а D – размерный коэффициент макродиффузии,

$$v = V \frac{\Delta t}{\Delta x} \quad (3)$$

- безразмерная; V – размерная скорость конвективного переноса.

В матрице (1) для ячеек переменного объема при элементах, содержащих d , появляются корректирующие множители – отношения масс ячеек. Если переход происходит в ячейку большего объема, то для обратного перехода этот множитель имеет вид, указанный в матрице. В противном случае он появляется в элементе, относящемся к прямому переходу.

Для того, чтобы асимптотическое распределение масс $m(j)$ совпадало с заранее заданным распределением $M(j)$, скорости конвективного переноса должны определяться из равенства

$$v(j) = \frac{Q(j)\Delta t}{M(j)}, \quad (4)$$

которое в матричной форме имеет вид

$$v = (Q./M)\Delta t, \quad (5)$$

где Q и M – соответствующие векторы подачи материала в цепь и предельных масс материала в ячейках, а оператор $./$ означает поэлементное деление векторов.

Если подача осуществляется только в первую ячейку, то $Q(j)=Q_{in}=\text{const}$. Однако подача может быть и распределенной, а также возможен и отвод материала по длине реактора. Различные варианты дают следующий вид вектора подачи материала:

-подача в первую ячейку

$$\mathbf{Q}_f = [Q_{in} \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ \dots \ 0]; \quad (6)$$

- подача в первую ячейку и распределенная подача в последующие ячейки

$$\mathbf{Q}_f = [Q_{in}+Q_{fd}(1) \ Q_{fd}(2) \ Q_{fd}(3) \ Q_{fd}(4) \ Q_{fd}(5) \ \dots \ Q_{fd}(m)]; \quad (7)$$

- подача в первую ячейку и распределенный отвод из последующих ячеек

$$\mathbf{Q}_f = [Q_{in}-Q_{fd}(1) \ -Q_{fd}(2) \ -Q_{fd}(3) \ -Q_{fd}(4) \ -Q_{fd}(5)\dots \ Q_{fd}(m)] \quad (8)$$

(в последнем случае $\sum Q_{fd}(j)$ должна быть меньше, чем Q_{in}).

Вектор \mathbf{Q} , входящий в равенство (5), определяется как

$$\mathbf{Q} = \text{cumsum}(\mathbf{Q}_f), \quad (9)$$

где **cumsum** – оператор кумулятивного суммирования от 1 до j.

Базовое матричное уравнение для описания эволюции процесса имеет вид

$$\mathbf{m}(k+1)=\mathbf{P}*\mathbf{m}(k)+\mathbf{Q}(k)\Delta t, \quad (10)$$

где k – номер перехода – дискретный аналог текущего времени.

Полная масса материала в реакторе рассчитывается как

$$M=\sum M(j). \quad (11)$$

Для случая подачи материала в первую ячейку среднее время его пребывания в реакторе равно

$$t_f = \frac{M}{Q_{in}}. \quad (12)$$

При подаче материала или трассера в виде ступенчатой функции при $t=0$ кумулятивное распределение времени пребывания материала в реакторе описывается формулой:

$$Q_{out}(k)= m(m,k)*v(m)=f_c(k\Delta t), \quad (13)$$

из которой легко получить формулу для традиционно используемого дифференциального распределения времени пребывания

$$q_{out}(k)= (Q_{out}(k+1) - Q_{out}(k))/\Delta t = f_d(k\Delta t). \quad (14)$$

Для распределенной подачи смысл распределения времени пребывания не очевиден и требует специального определения.

Пример расчета установившихся параметров движения и эволюции процесса к установившемуся состоянию для ступенчатого реактора с распределенным по нескольким ячейкам отводом материала (то есть для довольно сложной комбинации параметров процесса) показан на рис.2.

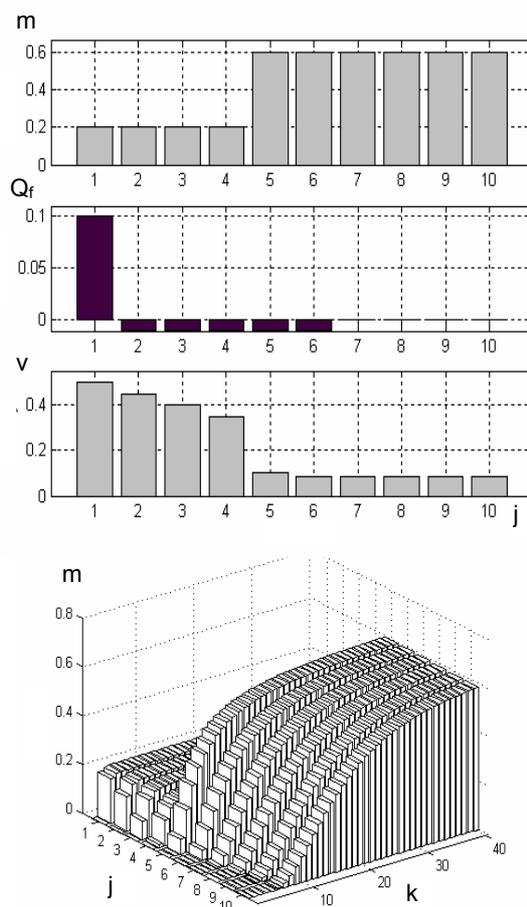


Рис.2. Распределение установившихся параметров потока сыпучего материала по длине реактора и кинетика перехода в установившееся состояние.

На основе разработанной модели рассмотрим ряд задач по управлению процессами, протекающими в реакторе.

Пусть в сыпучем материале протекает простая химическая реакция первого порядка

$$\frac{dc_A}{dt} = -k_A c_A, \quad (15)$$

где c_A – концентрация разлагающегося компонента A; k_A – постоянная скорости реакции.

Полагая $c_A(0)=1$, рассмотрим изменение c_A по длине реактора при различном распределении вдоль него массы сыпучего материала, которым можно управлять, меняя по длине диаметр барабана или делая его ступенчатым. В качестве условия сравнения примем постоянными подачу исходного вещества и полную загрузку реактора материалом. Поскольку согласно (12) среднее время пребывания материала в реакторе в этом случае остается одинаковым, то и концентрация на выходе из него будет одинаковой для всех сравниваемых вариантов. Однако нас интересует, как можно управлять реакцией по длине реактора, а здесь при изменении загрузки локальное время пребывания в отдельных ячейках уже будет меняться.

Разностная форма уравнения кинетики (15) имеет вид

$$c_{Aj}(k+1)= c_{Aj}(k) - k_A c_{Aj}(k)\Delta t. \quad (16)$$

Подключение этого уравнения к общей матричной процедуре моделирования дает возможность рассчитать распределение концентрации и содержания вещества А по длине реактора. Пример расчета показан на рис.3.

Если разложение вещества А является единственной целью процесса, то в конечном счете неважно, как меняется концентрация по длине: важен толь-

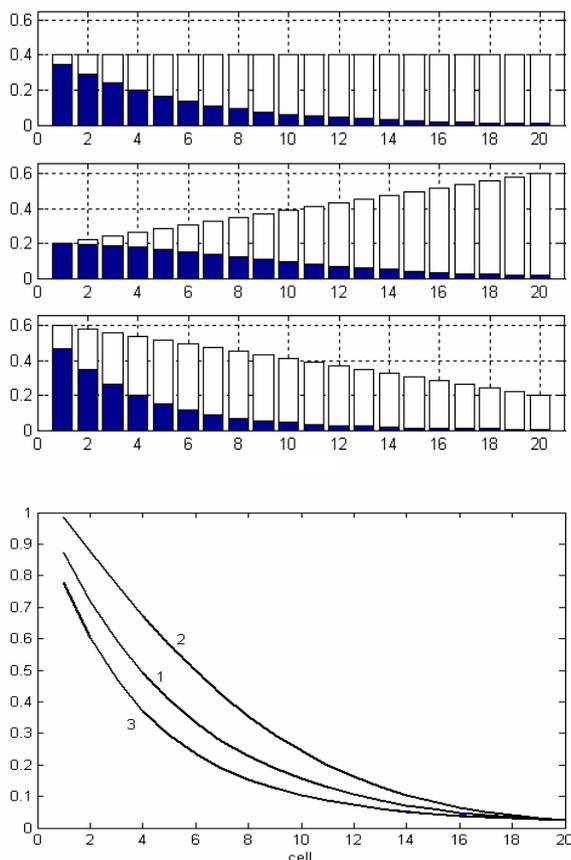


Рис.3. Распределения содержания компонента А по реактору при различных формах его проточной части (вверху) и изменение концентрации А по длине (внизу) при $d=0.15$, $k_A=0.1$.

ко конечный результат. Но при протекании нескольких реакций уже становится принципиально важной их синхронизация, и управление процессом по длине реактора может эту синхронизацию реализовать.

Теперь перейдем к моделированию теплообмена между потоками сыпучего материала и газа, считая, что описанная выше модель подходит для описания стохастического движения обоих компонентов. Представим потоки материала и газа параллельными цепочками с одинаковым числом ячеек. Предположим, что в течение каждого перехода происходит следующая последовательность событий: сначала сходственные ячейки цепей обмениваются теплом без движения компонентов вдоль цепей, а затем компоненты перемещаются вдоль цепей, перенося с собой массу и тепло, но уже нет обмена между цепями.

Перенос тепла между ячейками цепей может быть описан известными балансовыми соотношениями

$$\Delta Q_j(k) = \alpha_j S_j (t_{gj}(k) - t_{sj}(k)) \Delta t = a_j (t_{gj}(k) - t_{sj}(k)), \quad (17)$$

где α - коэффициент теплоотдачи, S – поверхность теплообмена в ячейке, t – температура, a_j – безразмерный коэффициент теплоотдачи, а индексы g и s относятся к газу и сыпучему материалу соответственно.

В конечном счете мы заинтересованы в поиске распределения температур, но сама температура не является аддитивным свойством и не может «перемещаться» из ячейки в ячейку. Этим свойством обладает тепло, но чтобы определить тепловой поток между цепями, нужна разность температур. Поэтому расчет связан с повторяющимся пересчетом тепловой энергии на температуры и температур на тепловые энергии.

Количества тепла в j -ой ячейке для газа и в j -ой ячейке для материала после акта обмена между цепями соответственно равны

$$Q_{gj}^+(k) = Q_{gj}(k) - \Delta Q_j(k); \quad (18)$$

$$Q_{sj}^+(k) = Q_{sj}(k) + \Delta Q_j(k). \quad (19)$$

Затем это тепло эволюционирует вдоль цепей

$$Q_g(k+1) = P_g Q_g(k) + Q_{gf}; \quad (20)$$

$$Q_s(k+1) = P_s Q_s(k) + Q_{sf} \quad (21)$$

где P_g и P_s – матрицы переходных вероятностей для газа и материала соответственно, Q_{gf} и Q_{sf} – векторы поступления тепла в реактор с газом и материалом. Для проточного реактора с подачей только в первые ячейки эти векторы имеют вид:

$$Q_{gf} = [c_g t_{g0} Q_g \Delta t \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad \dots \quad 0]; \quad (22)$$

$$Q_{sf} = [c_s t_{s0} Q_s \Delta t \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad \dots \quad 0] \quad (23)$$

где c – удельные теплоемкости, t_0 – начальные температуры и Q – массовые расходы газа и материала.

Для расчетов на следующем временном интервале необходимо снова перейти к температурам компонентов, чтобы рассчитать тепловые потоки между ячейками параллельных цепей. Этот переход выполняется по формулам:

$$t_{gj}(k+1) = \frac{Q_{gj}(k+1)}{c_{gj} m_{gj}(k+1)}, \quad t_{sj}(k+1) = \frac{Q_{sj}(k+1)}{c_{sj} m_{sj}(k+1)} \quad (24)$$

где эволюция масс в ячейках рассчитывается по тем же матрицам, что и для теплоты.

В целом описанный подход построен на тех же балансовых соотношениях, что и для обычного теплообмена, но учитывает продольное перемешивание в потоках компонентов, вызванное их стохастичностью и приводящее к заметным количественным, а иногда и качественным особенностям.

Окончательная система расчетных соотношений модели, записанная в матричной форме, имеет вид:

$$\Delta Q(k) = a \cdot (t_g(k) - t_s(k)); \quad (25)$$

$$Q_g(k) = Q_g(k) - \Delta Q(k), \quad (26)$$

$$Q_s(k) = Q_s(k) + \Delta Q(k), \quad (27)$$

$$m_g(k+1)=P_g \cdot m_g(k)+m_{g0}, \quad (28)$$

$$m_s(k+1)=P_s \cdot m_s(k)+m_{s0}, \quad (29)$$

$$Q_g(k+1)=P_g \cdot Q_g(k)+t_{g0} \cdot m_{g0} \cdot c_g, \quad (30)$$

$$Q_s(k+1)=P_s \cdot Q_s(k)+t_{s0} \cdot m_{s0} \cdot c_s, \quad (31)$$

$$t_g(k+1)=Q_g(k+1)/(m_g(k+1) \cdot c_g), \quad (32)$$

$$t_s(k+1)=Q_s(k+1)/(m_s(k+1) \cdot c_s). \quad (33)$$

Некоторые результаты численных экспериментов, выполненных по модели (25)-(33), показаны на рис.4,5. Все расчеты относятся к постоянным по длине и времени теплофизическим свойствам материала и газа и коэффициентам переноса, хотя учет их возможной переменности (нелинейные модели) не представляет никаких трудностей, если есть соответствующие расчетные зависимости.

Рис.4 иллюстрирует расчетную кинетику выхода параметров реактора на установившееся состояние. Эту кинетику можно рассматривать и как переходный процесс в реакторе, но только по теплообмену, так как все переходные вероятности в соответствующих матрицах определены для установившихся параметров движения. Иначе говоря, в реакторе уже существовал установившийся гидродинамический режим с нулевой температурой компонентов, когда температура газа скачком увеличилась до единицы.

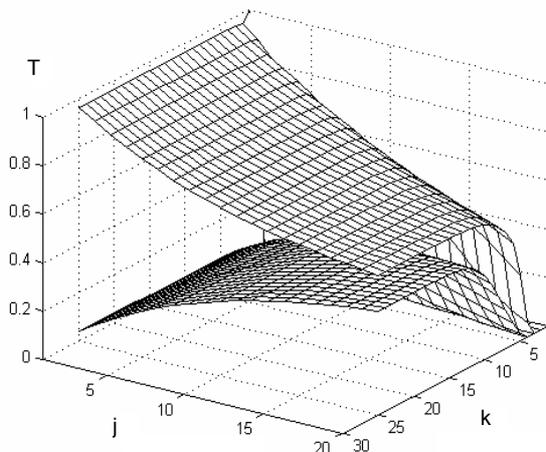


Рис.4. Переходный процесс и установившиеся распределения температур греющего газа и материала при прямом теплообмене.

Данные, представленные на рис.5, возвращают к задаче управления процессами в реакторе путем изменения распределения его загрузки сыпучим материалом (см. рис.3). Здесь иллюстрируется возможность управления распределением температур компонентов (естественно, при одинаковом полном перепаде температур, так как расходы и температуры компонентов на входе остаются постоянными). Затягивание или, наоборот, ускорение прогрева материала по длине реактора имеет важное значение при протекании в материале нескольких физико-химических процессов (например, сушки и обжига глины на керамзит), когда каждый процесс имеет свои пред-

почтительные интервалы температур эффективного проведения.

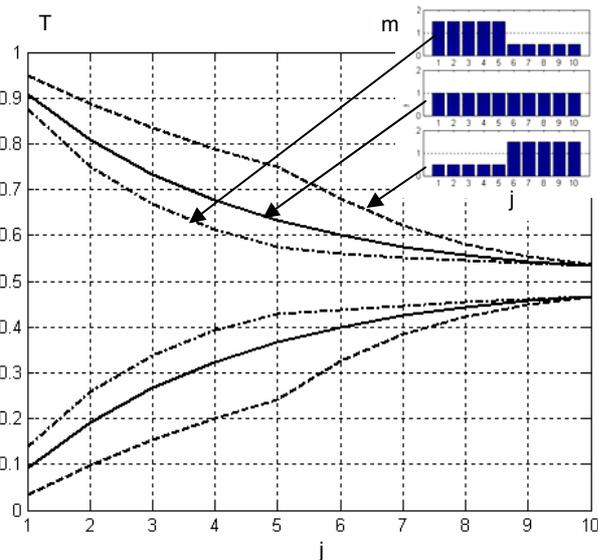


Рис.5. Влияние распределения массы материала по длине реактора на распределения температур.

Интерпретируя результаты представленных численных экспериментов, необходимо отметить, что установившиеся распределения существенно зависят от того, меняется ли вместе с массой поверхность теплообмена. Если эта поверхность, входящая в коэффициент a_j , не меняется (например, при каскадном, а не водопадном движении сыпучего материала в сечении вращающегося барабана), то изменение массы никак не сказывается на установившихся распределениях температур, а проявляется только в переходном процессе. Представленные на рис.5 результаты относятся к случаю, когда поверхность теплообмена в ячейке прямо пропорциональна массе материала в ней, что ближе к практическому случаю водопадного движения материала в сечении. Очевидно, что и любая промежуточная гипотеза о связи поверхности теплообмена с массой материала может быть легко включена в рассматриваемую модель.

Таким образом, предложенная модель позволяет при соответствующем эмпирическом обеспечении моделировать процессы тепло- и массообмена между стохастически движущимися потоками сыпучего материала и газа, а также ставить и решать задачи оптимального управления этими процессами.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Tamir A.** Applications of Markov chains in Chemical Engineering. Elsevier publishers. – Amsterdam, 1998. – 604 p.
2. **V.E. Mizonov, H. Berthiaux, V.P. Zhukov and S. Bernotat.** Application of multi-dimensional Markov chains to model kinetics of grinding with internal classification // Int. J. Miner. Process. – V.74. – Issue 1001 (2004). – P.307–315.
3. **Berthiaux H., Mizonov V.** Applications of Markov Chains in Particulate Process Engineering: A Review // The Canadian Journal of Chemical Engineering. – 2004. – V.85. – №6. – P.143–168.