

Порядок составления математической модели (ММ):

1 стадия: Разбиение объекта на зоны с одинаковым гидродинамическим режимом.

Типовые режимы:

- Идеальное смешение (ИС)
- Идеальное вытеснение (ИВ)
- Диффузионная модель
- Ячеичная модель

Также выделяются зоны “смеситель” и “узел” – имеющие объём равный 0.

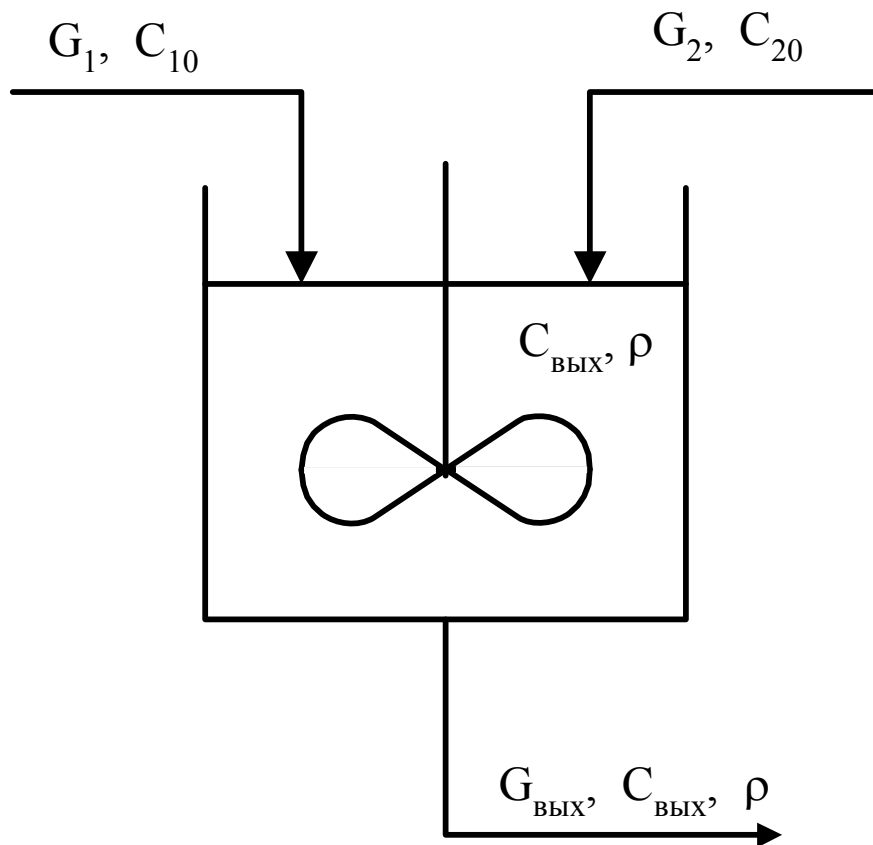
2 стадия: Формулируются допущения для каждой зоны, например: “термодинамические параметры постоянны”, “объём жидкости в ректоре постоянен”, $\rho = const$ и т.д.

3 стадия. Вводятся обозначения и указываются их размерности.

4 стадия. Для каждой зоны записываются уравнения материального баланса (МБ) (в общем случае число уравнений МБ равно или меньше числа присутствующих веществ), энергетического (теплового) баланса (ТБ) (одно для каждой зоны), и могут быть другие балансовые уравнения (по импульсу, электрическому заряду и др.), но в этом курсе они не рассматриваются.

Балансовые уравнения представляют собой дифференциальные уравнения, в правой части которых – производная по времени. Для из решения необходимо знать начальные условия (НУ) – значение переменной, по которой пишется баланс (если МБ, то количество вещества в зоне, если ТБ, то температура среды и т.д.) в начальный момент времени. Если балансовое уравнение пишется для стационарного режима, то производная по времени равна 0 и НУ не требуются.

Пример.



Выделяем одну зону.

Допущения в данном случае:

- ИС
- $T = \text{const}$, $\rho = \text{const}$ - теплофизические параметры постоянны
- $V = \text{const}$

!!!Примечание!!! запись $T = \text{const}$ означает, что температура T не меняется со временем, что она принимается постоянной. $V = \text{const}$ означает, что объём V не меняется со временем. T разумеется НЕ РАВНА V .

$[G] = \text{кг/с}$, $[C] = \text{кг компонента/кг смеси}$. (например 0,01 кг NaCl на кг раствора)

Общая масса содержимого реактора – M кг, объём – V [м^3], плотность – ρ [$\frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$].

Материальный баланс для растворённого вещества:

$$[G_1 C_{10} + G_2 C_{20}] - [G_{\text{вых}} C_{\text{вых}}] = \frac{d}{dt} [M C_{\text{вых}}] = \frac{d}{dt} [V \rho C_{\text{вых}}] = V \rho \frac{dC_{\text{вых}}}{dt}$$

Начальные условия (Н.У.):

$$C_{\text{вых}} \Big|_{t=0} = C_{\text{вых}}(0) = C_{\text{вых}}^H$$

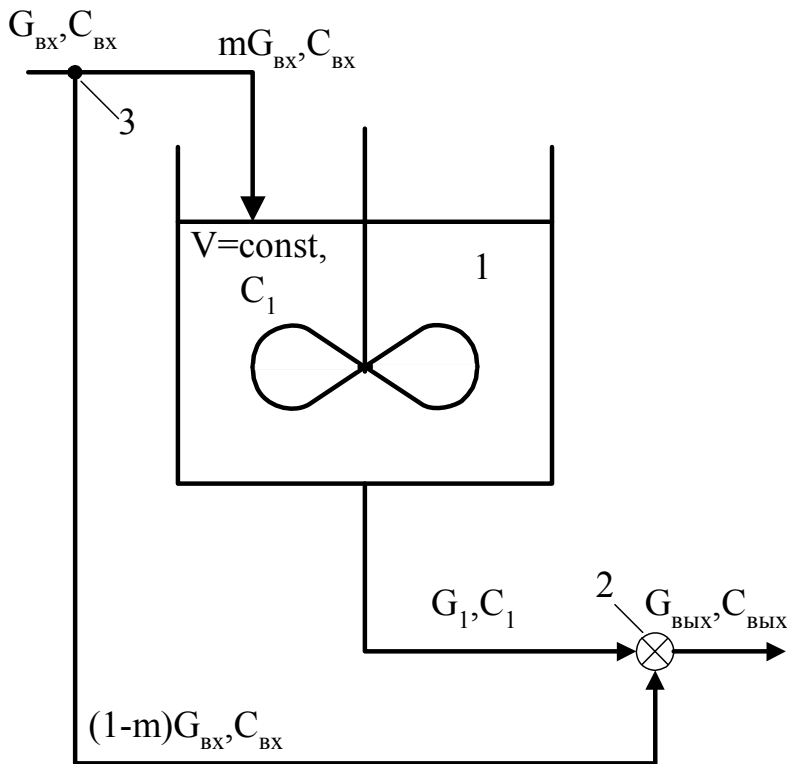
МБ для раствора в целом

$$[G_1 + G_2] - [G_{\text{ВЫХ}}] = \frac{d}{dt}[M] = \frac{d}{dt}[V\rho] = 0 \quad (\text{Т.к. } V = \text{const и } \rho = \text{const, то } V\rho = \text{const и } \frac{d}{dt}[V\rho] = 0)$$

Следовательно,

$$G_1 + G_2 = G_{\text{ВЫХ}}$$

Второй пример (байпас):



$$0 \leq m \leq 1$$

МБ по веществу в целом для первой зоны не требуется.

МБ по растворённому веществу для первой зоны:

$$[G_1(t)C_{\text{ex}}(t)] - [G_1(t)C_1(t)] = \frac{d}{dt}[V\rho C_1(t)]$$

$$C_{\text{ex}}(t) - C_1(t) = V\rho \frac{dC_1(t)}{dt}$$

$$\text{НУ: } C_1(0) = 0$$

МБ по веществу в целом для второй зоны:

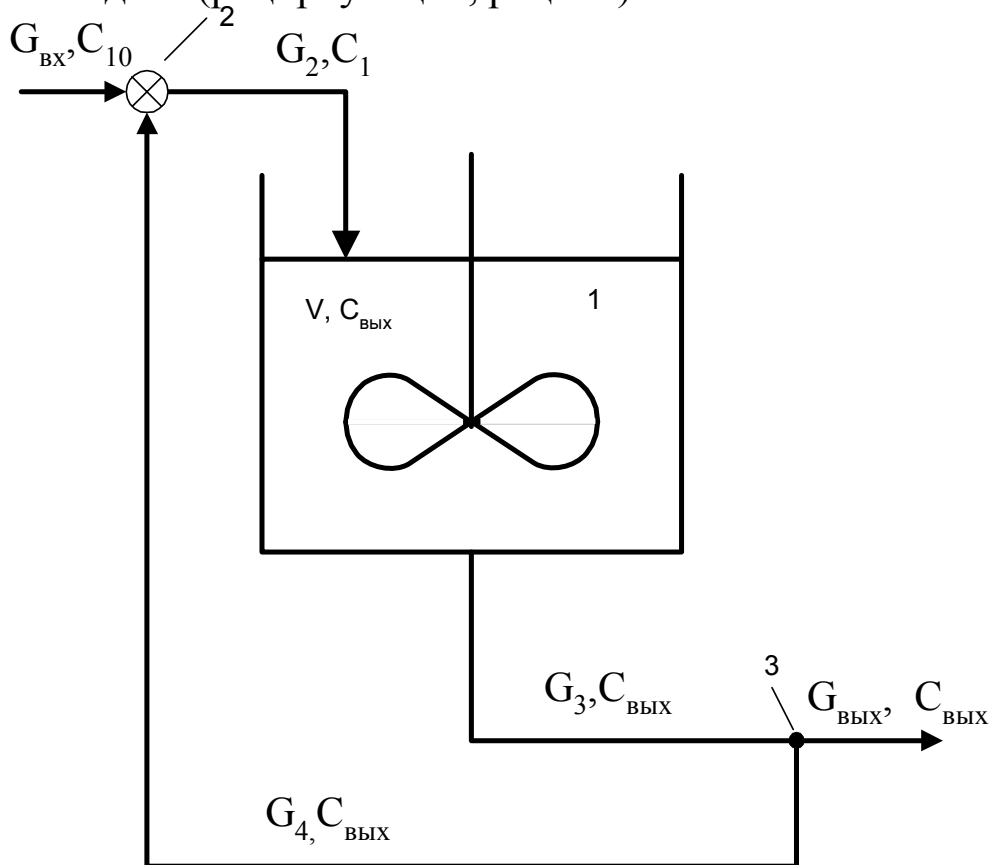
$$[G_1(t) + (1-m)G_{\text{ex}}(t)] - [G_{\text{вых}}(t)] = 0$$

МБ по растворённому веществу для второй зоны:

$$[G_1(t)C_1(t) + (1-m)G_{\text{ex}}(t)C_{\text{ex}}(t)] - [G_{\text{вых}}(t)C_{\text{вых}}(t)] = 0$$

Для третьей зоны балансовых уравнений не требуется.

Третья модель (рециркуляция, рецикл)



Допущения для 1 зоны:

ИС, $V = \text{const}$, $\rho = \text{const}$

МБ по веществу в целом для первой зоны:

$$[G_2(t)] - [G_3(t)] = \frac{d}{dt}[V\rho] = 0$$

МБ по растворённому веществу для первой зоны:

$$[G_2(t)C_1(t)] - [G_3(t)C_{\text{ВЫХ}}(t)] = \frac{d}{dt}[V\rho C_{\text{ВЫХ}}(t)]$$

$$[G_2(t)C_1(t)] - [G_3(t)C_{\text{ВЫХ}}(t)] = V\rho \frac{dC_{\text{ВЫХ}}(t)}{dt}$$

Т.к. $G_2(t) = G_3(t)$, то $C_1(t) - C_{\text{ВЫХ}}(t) = \frac{V\rho}{G_2(t)} \frac{dC_{\text{ВЫХ}}(t)}{dt}$

НУ: $C_{\text{ВЫХ}}(0) = 0$

МБ по веществу в целом для второй зоны:

$$[G_{\text{ВХ}}(t) + G_4(t)] - [G_2(t)] = 0$$

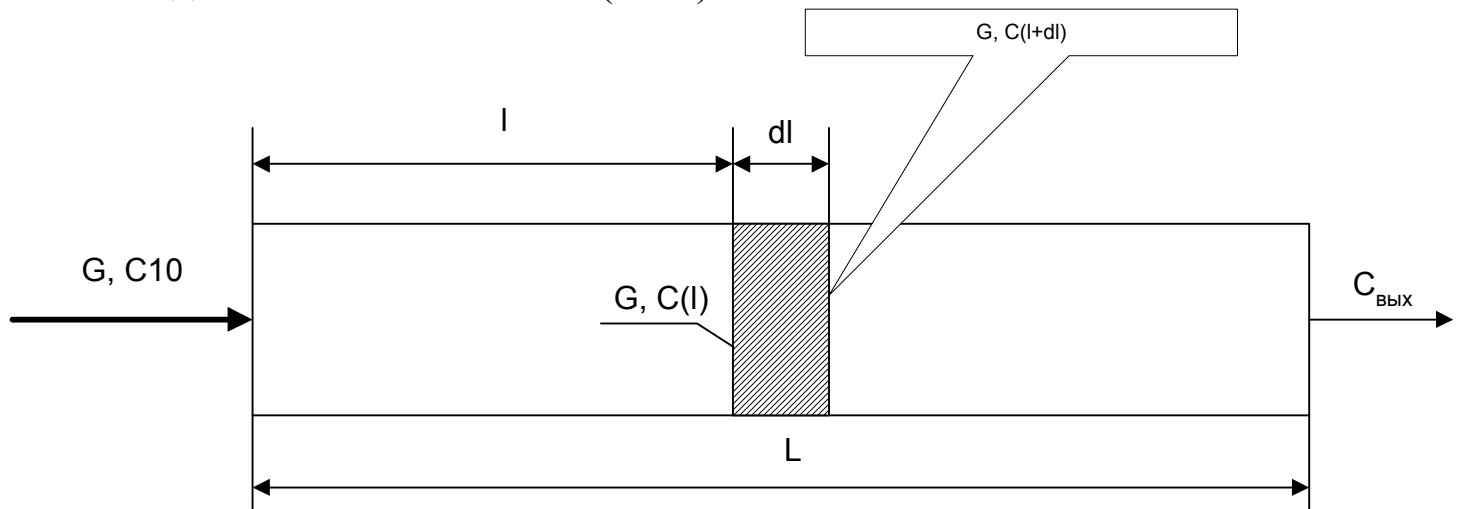
МБ по растворённому веществу для второй зоны:

$$[G_{\text{ВХ}}(t)C_{10}(t) + G_4(t)C_{\text{ВЫХ}}(t)] - [G_2(t)C_1(t)] = 0$$

МБ по веществу в целом для третьей зоны:

$$[G_3(t)] - [G_4(t) + G_{\text{ВЫХ}}(t)] = 0$$

Режим Идеального Вытеснения (РИВ)



Допущения:

- 1) ИВ
- 2) $T = \text{const}$
- 3) Диаметр $D = \text{const}$
- 4) $\rho = \text{const}$

$$[G] = \text{кг/с}, \quad [C] = \frac{\text{кг}_{\text{компонента}}}{\text{кг}_{\text{смеси}}}, \quad [l] = [\text{м}], \quad \text{объём} - V [\text{м}^3], \quad \text{плотность} - \rho \left[\frac{\text{кг}}{\text{м}^3} \right].$$

МБ для элементарного объёма на расстоянии l от начала реактора по растворённому веществу:

$$[GC(l,t)] - [GC(l+dl,t)] = \frac{\partial}{\partial t} [dV \rho C(l,t)]$$

т.к. dV не зависит от t , то

$$[GC(l,t)] - [GC(l+dl,t)] = dV \rho \frac{\partial C(l,t)}{\partial t}$$

$$dV = \frac{\pi D^2}{4} dl$$

$$C(l+dl,t) \approx C(l,t) + \frac{\partial C(l,t)}{\partial l} dl$$

$$[GC(l,t)] - \left[C(l,t) + \frac{\partial C(l,t)}{\partial l} dl \right] = \frac{\pi D^2}{4} dl \rho \frac{\partial C(l,t)}{\partial t}$$

$$GC(l,t) - GC(l,t) - G \frac{\partial C(l,t)}{\partial l} dl = \frac{\pi D^2}{4} dl \rho \frac{\partial C(l,t)}{\partial t}$$

$$-G \frac{\partial C(l,t)}{\partial l} dl = \frac{\pi D^2}{4} dl \rho \frac{\partial C(l,t)}{\partial t}$$

$$-G \frac{\partial C(l,t)}{\partial l} = \frac{\pi D^2}{4} \rho \frac{\partial C(l,t)}{\partial t}$$

$$-\frac{G}{\frac{\pi D^2}{4} \rho} \frac{\partial C(l,t)}{\partial l} = \frac{\partial C(l,t)}{\partial t}$$

$u = \frac{G}{\frac{\pi D^2}{4} \rho}$ - линейная скорость потока по длине реактора [м/с]

$$-u \frac{\partial C(l,t)}{\partial l} = \frac{\partial C(l,t)}{\partial t}$$

НУ: $C(l,0) = C(l,t)|_{t=0} = \tilde{C}(l)$

ГУ: $C(0,t) = C_{10}(t)$

Примечание. Поскольку мы не ввели допущения $G = \text{const}$, то имеется в виду что $G(t)$ и $u(t)$.

$$C_{\text{вых}}(t) = C(L,t) = C(l,t)|_{l=L}$$

Обратите внимание, что в окончательных уравнениях модели не должны фигурировать бесконечно малые величины dl , dV и т.п., а только производные $\frac{dT}{dt}$ и т.д.