

G.E. Sakhmetova<sup>1</sup>, A.M. Brenner<sup>1</sup>, V.V. Dil'man<sup>2</sup>, O.S. Balabekov<sup>3</sup>, D.A. Kovalev<sup>4</sup>

<sup>1</sup> South Kazakhstan State University named after M. Auezov, Shymkent;

<sup>2</sup>Institute of General and inorganic chemistry named after N. S. Kurnakov of RAS, Moscow;

<sup>3</sup>South Kazakhstan State Pedagogical Institute, Shymkent;

<sup>4</sup>All – Russian research Institute for electrification of agriculture, Moscow

[17-07-70@mail.ru](mailto:17-07-70@mail.ru)

## PECULIARITIES OF MODELING THE HEAT AND MASS TRANSFER WITH ACCOUNTING THE SCALING FOR BIOGAS PRODUCTION REACTORS

**Abstract.** In this work the new approach to modelling the heat and mass transfer in biogas reactors with account of the two levels of mathematical description has been submitted. The first level is the model of heat and mass transfer in the single particle of animal waste raw materials, and the second level is description of the scale factor under the calculation of an efficiency of mass transfer in the reactors. The approach is based on the dividing the apparatus work volume into zones with different ratios between interacting phases streams. The expressions obtained can be applied to design of biochemical reactors with allowance for the scaling phenomena.

**Key words:** biogas reactor, heat and mass transfer, waste, flow, zone, mathematical modeling, scaling.

УДК 628.336.6

Г.Е. Сахметова<sup>1</sup>, А.М. Бренер<sup>1</sup>, В.В. Дильман<sup>2</sup>, О.С. Балабеков<sup>3</sup>, Д.А. Ковалев<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Южно-Казахстанский государственный университет им. М. Ауэзова, г.Шымкент;

<sup>2</sup>Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, г.Москва;

<sup>3</sup>Южно-Казахстанский государственный педагогический институт, г. Шымкент;

<sup>4</sup>Всероссийский научно-исследовательский институт сельского хозяйства, г. Москва,

## ОСОБЕННОСТИ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕДАЧИ ТЕПЛА И МАССЫ И МАСШТАБНЫЙ ПЕРЕХОД В РЕАКТОРАХ ПРОИЗВОДСТВА БИОГАЗА

**Аннотация.** В данной работе описан новый подход математического моделирования с учетом двух уровней тепло-и массообмена в биогазовых реакторах. Первый уровень - это модель тепло- и массообмена в одной частице сырья отходов животноводства и второй уровень-это описание масштабного коэффициента при расчете эффективности массообмена в реакторах. Этот подход основан на делении реактора на зоны с различным соотношением между взаимодействующими фазами потоков. Полученные выражения могут быть применены для проектирования биохимических реакторов с учетом явления масштабирования.

**Ключевые слова:** биогазовых реактор, тепло-массообмен, отходы, потоки, зона, математическое моделирование, масштабирование.

### 1. Введение

Расчет и проектирование установок для производства биогаза из животноводческих отходов представляет значительные трудности по целому ряду причин. Анализ ряда новых работ [1, 2, 3]

показывает, что эти трудности возникают как на этапе лабораторных исследований, так и при переходе к опытно-промышленной установке и при выдаче достоверных исходных данных для проектирования промышленной установки.

Основные особенности процесса, способствующие возникновению упомянутых трудностей, перечислены ниже.

1. Разнородность химического состава, непостоянство влажности, консистенции, дисперсности и степени однородности перерабатываемого сырья.

2. Адаптация к условиям климата, что усложняет выбор оптимальной технологии и режима сбраживания. При этом, выбор может быть сделан в пользу как мезофильного, так и термофильного режимов [1, 2].

3. Степень и временной режим перемешивания, оптимальный выбор которых существенно зависит от состава сырья и от габаритов реактора.

4. Технологический режим не может быть однозначно определен без конкретизации производительности установки, которая, в свою очередь, зависит от параметров сырья. Однако параметры отходов животноводства, как отмечено выше, вряд ли могут быть заданы с необходимой определенностью.

5. Производительность установки для производства биогаза определяется также качеством и количеством вносимой смеси энзимов, пробиотиков и микроэлементов [1].

Таким образом, можно сделать вывод, что для создания надежной инженерной методики расчета процесса в реакторе биогаза необходимо моделировать процессы теплообмена на двух уровнях описания: на локальном уровне - для отдельных частиц обрабатываемой в реакторе гетерофазной смеси, а также на уровне полного объема реакционной смеси с учетом локальных характеристик и распределения сырья в объеме аппарата.

При этом модели должны сохранять необходимую степень обобщенности описания, позволяющей при разработке проекта использовать данные о конкретных характеристиках сырья и условиях его переработки. Иначе говоря, модели изначально должны быть ориентированы на полумпирическое моделирование. На основании таких моделей может быть осуществлен технологический расчет процесса, выбрано оптимальное оборудование и произведен его конструктивный расчет с учетом технологических характеристик.

В настоящей работе дается краткое описание подходов к обоим уровням математического моделирования реакторов биогаза.

## 2. Локальный уровень моделирования

Экспериментальное исследование тепло и массообменных процессов на поверхности и в глубине отдельных частиц пористого сырья сложного состава в условиях многостадийной химической реакции не только затруднительно, но и, вследствие уже отмеченных причин неполноты информации о составе сырья, вряд ли практически целесообразно.

### 2.1 Математическая модель теплопереноса в отдельной пористой частице перерабатываемого сырья в слое неадиабатического реактора.

Т.к. процесс химических превращений наиболее интенсивно идет на поверхности частицы, основное тепловыделение за счет химической реакции будем считать локализованным в некоторой области вблизи поверхности. Тогда описание процесса можно вести в рамках приближения, предложенного в работах [4, 5] для слоя пористого катализатора.

$$\frac{\lambda}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dT}{dr} \right) + q = 0 \quad (1)$$

где  $r$  - текущий радиус частицы;  $T$  - температура;  $\lambda$  - коэффициент теплопроводности;  $q$  - тепловыделение в единице объема частицы.

Тепловыделение определяем на основе формулы Аррениуса:

$$q = q_v kc \left( 1 - \frac{E}{RT_*} \right) \exp(-E/RT) \quad (2)$$

где  $q_v$  - удельная теплота реакции;  $k$  - константа скорости реакции;  $c$  - концентрация основного реагента в поверхностной зоне;  $E$  - энергия активации;  $R$  - газовая постоянная.

Т.к. процесс происходит в области умеренных температурных градиентов, разложим выражение (2) в ряд Тейлора в окрестности температуры зажигания и ограничимся первыми членами разложения:

$$q = q_v kc \exp(-E/RT_*) + q_v kc \frac{E}{RT_*^2} (T - T_*) \exp(-E/RT_*) \quad (3)$$

где  $T_*$  - температура зажигания реакции.

Тогда тепловыделение определяется двумя составляющими: первая является постоянной и определяется температурой зажигания реакции, а вторая зависит от переменной температуры зерна:

$$q_* = q_v kc \exp(-E/RT_*) \left( 1 - \frac{E}{RT_*} \right) \quad (4)$$

Уравнение (1) запишем в виде:

$$\lambda \frac{d^2T}{dr^2} + \frac{2\lambda}{r} \frac{dT}{dr} + q_* + DT = 0 \quad (5)$$

где

$$D = q_v kc \frac{E}{RT_*^2} \exp(-E/RT_*) \quad (6)$$

Граничное условие при  $r = r_e$  :

$$\lambda \frac{dT}{dr} \Big|_{r=r_e} = \alpha (T_\infty - T_e) \quad (7)$$

где  $\alpha$  - коэффициент теплоотдачи;  $T_e$  - температура поверхности зерна;  $T_\infty$  - температура окружающей среды.

Запишем уравнение (5) в безразмерной форме:

$$\frac{\lambda}{r_e} \bar{r} \frac{d^2T}{d\bar{r}^2} + 2 \frac{\lambda}{r_e} \frac{dT}{d\bar{r}} + D r_e \bar{r} T = 0 \quad (8)$$

где  $\bar{r} = r/r_e$ .

Общее решение уравнения (8) имеет решение в виде суперпозиции функций Бесселя и Неймана [6]:

$$T = \frac{1}{\sqrt{\bar{r}}} \left[ C_1 J_{1/2} \left( r_e \bar{r} \sqrt{\frac{D}{\lambda}} \right) + C_2 Y_{1/2} \left( r_e \bar{r} \sqrt{\frac{D}{\lambda}} \right) \right] \quad (9)$$

После ряда преобразований можно получить аппроксимацию выражения (9) для случая постоянного тепловыделения [4]

$$\Delta T = T - T_{\infty} = \frac{q_* r_e^2}{3\lambda} \left[ \frac{1 - \gamma^3}{Nu} + \frac{1 - \bar{r}^2}{2} + \gamma^3 \left( 1 - \frac{1}{\bar{r}} \right) \right] \quad (10)$$

Здесь 
$$Nu = \frac{\alpha d}{\lambda}, \quad \gamma = \frac{r_i}{r_e}$$

Использование предложенной модель предполагает привлечения минимума эмпирических данных [4].

## 2.2 Математическая модель локальных диффузионных процессов в отдельной пористой частице.

С учетом химического источника и коэффициента формы частицы  $\Psi$  система уравнений тепло и массопереноса имеет вид [5]:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_{eff} \left( \frac{\partial^2 c}{\partial r^2} + \frac{\Psi}{r} \frac{\partial c}{\partial r} \right) - kc \exp(-E/RT) \quad (11)$$

$$C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_{eff} \left( \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{\Psi}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right) + q_r kc \exp(-E/RT) \quad (12)$$

где  $c$  - концентрация;  $D_{eff}$  - эффективный коэффициент диффузии;  $t$  - время процесса.

Граничные условия для процесса переноса тепла и массы на поверхности частицы):

$$r = R. \beta(c_s - c) = D_{eff} \frac{\partial c}{\partial r}, \quad \alpha(T_s - T) = \lambda_{eff} \frac{\partial T}{\partial r} \quad (13)$$

$$r = 0. \frac{\partial c}{\partial r} = \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad (14)$$

где  $\beta$  - коэффициент массоотдачи;  $\alpha$  - коэффициент теплоотдачи;  $c_s, T_s$  - концентрация и температура на поверхности частицы.

Оценка величины коэффициента внутренней диффузии может быть дана в виде:

$$D_{eff} \approx \frac{R^2}{4t_c} \approx \frac{R \langle V \rangle}{4} \quad (15)$$

где  $t_c$  - характерное время внутренней диффузии,  $\langle V \rangle = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m}}$  - средняя скорость теплового движения молекул,  $k_B$  - константа Больцмана,  $m$  - молекулярная масса.

Оценку эффективного коэффициента теплопроводности, получаем с помощью управляющего параметра- числа Льюиса  $Le$  :

$$\lambda_{eff} = Le C_p D_{eff} \quad (16)$$

Для характерного времени внутренней диффузии используется приближение порядка времени стабилизации процесса насыщения внутренней поверхности пор адсорбента улавливаемым компонентом [5, 7].

Для перехода к стадии масштабирования нужно связать параметры, характеризующие микроскопическую структуру пористой частицы, и макроскопические параметры, определяемые эмпирически.

Такая связь может быть получена с помощью оценки числа Кнудсена:

$$\text{Kn} \approx \frac{1}{K_m (1 - \omega)^2} \quad (17)$$

где  $K_m$  и  $\omega$  - эмпирические константы.

### 3. Масштабный переход

Реальная гидродинамическая структура в аппарате не описывается точно ни одной из стандартных моделей: идеального вытеснения, смешения или диффузионной.

Поэтому в нашей работе предлагается подход к моделированию реакторов со сложной структурой потоков взаимодействующих фаз, основанный на опыте моделирования влияния распределения фаз в абсорберах на эффективность массообмена [2].

В соответствии с этим подходом весь объем аппарата делится на зоны взаимодействия, характеризующихся различными соотношениями взаимодействующих потоков. Предполагается, что структура потоков в выделенном малом элементе объема реактора соответствует структуре потоков в лабораторном аппарате с таким же соотношением потоков и равномерным распределением фаз [8].

Тогда при неравномерном распределении потоков предполагаем, что каждому элементу объема можно поставить в соответствие локальное значение объемного коэффициента массопередачи, определяющегося соотношением потоков в этом объеме и полученное на лабораторных установках малого размера с известной структурой потоков. При этом расчет значений коэффициентов массопередачи (как и теплопередачи) можно производить по схеме идеального вытеснения [1, 2].

Тогда для элементарных объемов реактора можно записать следующую систему уравнений [8]:

$$\frac{\partial Y}{\partial z} = L(z, r) \frac{\partial X}{\partial z}; \quad \frac{\partial Y}{\partial z} = K_v(z, r) \frac{d\chi}{dV} \quad (18)$$

Здесь  $X, Y$  - безразмерные концентрации взаимодействующих реагентов;  $K_v$  - объемный коэффициент массопередачи;  $z$  - продольная координата;  $r$  - радиальная координата;  $\chi$  - степень превращения;  $V$  - объем реактора;  $L$  - соотношение потоков взаимодействующих фаз.

В первом приближении для линейной рабочей линии процесса систему (18) можно привести к виду:

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 Y}{\partial z^2} - D(z, r) \frac{\partial Y}{\partial z} = 0, \\ \frac{\partial^2 X}{\partial z^2} - \left[ D(z, r) - \frac{\partial(\ln L)}{\partial z} \right] \frac{\partial X}{\partial z} = 0. \end{cases} \quad (19)$$

Здесь использовано представление об эффективном коэффициенте диффузии [8]:

$$D(z, r) = \frac{\partial(\ln K_v)}{\partial z} + K_v(\lambda - 1) \quad (20)$$

Вводится также понятие, эквивалентное фактору абсорбции и усредненный по сечению реактора коэффициент массопередачи [8]:

$$\lambda = k_{st} \frac{J_x}{J_y} = k_{st} L \quad (21)$$

Очевидно, что среднее значение  $\lambda$  не зависит от характера распределения потоков и

постоянно по длине реактора. Поэтому, если зависимость коэффициентов массообмена от соотношения и структуры потоков известна, то соответствующее среднее значение можно вычислить по формуле:

$$\bar{K}_v = \frac{1}{f} \iint_f K_v(L) df \quad (22)$$

На основе предлагаемого подхода удастся получить формулы для расчета степени превращения веществ в реакторе со сложной структурой потоков взаимодействующих фаз, которые приспособлены для адаптации к модели масштабного перехода:

$$\chi = \left\{ \left[ \exp\left(\frac{\lambda-1}{J_Y} f \int_0^H \bar{K}_v ds\right) - 1 \right] / \left[ \lambda \exp\left(\frac{\lambda-1}{J_Y} f \int_0^H \bar{K}_v ds\right) - 1 \right] \right\} \left( 1 - \frac{k_{st} X_0}{Y_0} \right) \quad (23)$$

Масштабный переход тогда описывается через учет наличия в аппарате  $n$  последовательных участков с различающимися на каждом участке коэффициентами массообмена.

Тогда для расчета степени превращения получаем:

$$\chi = \frac{\exp\left(\frac{\lambda-1}{J_Y} f \sum_{i=1}^n \int_0^{H_i} \bar{K}_{v(i)} ds\right) - 1}{\lambda \exp\left(\frac{\lambda-1}{J_Y} f \sum_{i=1}^n \int_0^{H_i} \bar{K}_{v(i)} ds\right) - 1} \left( 1 - \frac{k_{st} X_0}{Y_0} \right). \quad (24)$$

Предлагаемая модель позволяет в полной мере использовать результаты лабораторных исследований на малогабаритных установках и на их основании производить расчеты промышленных аппаратов. Далее предполагается максимально адаптировать этот подход к инженерным методикам и произвести его проверку в реальных условиях.

#### ЛИТЕРАТУРА

[1] Baranova M.P., Ekaterinchev V.M., Abashev N.L. The problems of designing and creating a pilot plant producing biogas from animal waste APK Siberia, J. Sib. Fed. Univ. Eng. technol., 2017, 10(1), стр. 106-112.

[2] Сафаров Руслан Рафигоглы. Моделирование гидродинамики и массообмена в полволоконном мембранном биореакторе (на примере культивирования клеток млекопитающих)/Диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук, Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, Москва, 2016.

[3] Карлаш, Ю. В. Особенности массообмена в биореакторах при интенсификации и масштабировании процессов микробиологического синтеза // П. П. Лобода, Ю. В. Карлаш // Гидродинамика и процессы переноса в биореакторах : сб. научных трудов - Новосибирск : Институт теплофизики СО АН СССР, 1989. - С. 25-35.

[4] Б.Р. Кожатаев, А.М. Аширов, М. Дуйсебекова, Ж.Ж. Мадьярова. Моделирование стационарного теплообмена в зерне катализатора//Вестник НИА РК 2005, №3, с. 20-25.

[5] Б.Р. Кожатаев, А.М. Аширов, М. Дуйсебекова, Ж.Ж. Мадьярова. Моделирование диффузионных процессов в слое пористого катализатора//Вестник НИА РК 2005, № 5, с. 92-96.

[6] Зайцев В.Ф., Полянин А.Д. Справочник по линейным обыкновенным дифференциальным уравнениям. М. Факториал. 1997, 305 с.

[7] Aris R. The mathematical theory of diffusion and reaction in permeable catalysts. Clarendon Press, Oxford, 1975.

[8] Brenner A.M. Adaptation of random walk methods to the modelling of liquid distribution in packed columns// Advances in Fluid Mechanics, IV.- Southampton, Boston.: WIT Press.- 2002.- P. 291-300.

#### REFERENCES

[1] Baranova M.P., Ekaterinchev V.M., Abashev N.L. The problems of designing and creating a pilot plant producing biogas from animal waste APK Siberia, J. Sib. Fed. Univ. Eng. technol., 2017, 10(1). P. 106-112.

[2] Safarov R.R. Modeling of hydrodynamics and mass transfer in hollow fiber membrane bioreactor (for example, cultivation of mammalian cells)/The dissertation on competition of a scientific degree of candidate of technical Sciences/ Russian chemical-technological University after D. I. Mendeleev, Moscow, 2016.

[3] Karlash, Y.V., P.P.Loboda, Karlash Y.V. Peculiarities of mass transfer in bioreactors in intensification and scaling of processes of microbiological synthesis//Fluid flow and transport processes in bioreactors.collection of scientific works - Novosibirsk : Institute of Thermophysics SB AS USSR.1989, P. 25-35.

[4] Karataev B.R., Ashirov A.M., Duisebekova M., Mad'yarova J. J. Modeling of stationary heat transfer in the grain of the catalyst //Herald RA RK 2005, №3. P. 20-25.

[5] Karataev B.R., Ashirov A.M., Duisebekova M., Mad'yarova J. J. Modeling of diffusion processes in the porous catalyst layer //Herald RA RK 2005, № 5.-P. 92-96.

[6] Zaisev V.F., Polanin A.D. Handbook of linear ordinary differential equations. M. Faktorial. 1997, P.305.

[7] Aris R. The mathematical theory of diffusion and reaction in permeable catalists. Clarendon Press, Oxford, 1975.

[8] Brenner A.M. Adaptation of random walk methods to the modelling of liquid distribution in packed columns// Advances in Fluid Mechanics, IV.- Southampton, Boston.: WIT Press. 2002, P. 291-300.

ӘОЖ: 628.336.6

**Г.Е. Сахметова<sup>1</sup>, А.М. Бренер<sup>1</sup>, В.В. Дильман<sup>2</sup>, О.С. Балабеков<sup>3</sup>, Д.А. Ковалев<sup>4</sup>**

<sup>1</sup>М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан мемлекеттік университеті, Шымкент қ., Қазақстан;

<sup>2</sup>Н.С. Курнаков атындағы Жалпы және бейорганикалық химия институты, Москва қ., Ресей;

<sup>3</sup>Оңтүстік Қазақстан мемлекеттік педагогикалық институты, Шымкент қ., Қазақстан;

<sup>4</sup>Бүкілресейлік ғылыми-зерттеу ауыл шаруашылығы институты, Москва қ., Ресей

### **БИОГАЗДЫ ӨНДІРУ РЕАКТОРЛАРДА МАСШАБТЫ ӨТПЕ ЖӘНЕ ЖЫЛУ МЕН МАССАНЫ БЕРУ ПРОЦЕСТЕРДІҢ МОДЕЛЬДЕУ ЕРЕКШЕЛІКТЕРІ**

**Аннотация.** Осы жұмыста биогаз реактордағы жылу және масса алмасудың екі деңгейінің ескеріп жаңа математикалық модельдеу тәсілі сипатталған. Бірінші деңгей – ол мал шаруашылық қалдықтарының шикізатының бір бөлшегіндегі жылу-және масса алмасу моделі және екінші деңгей - ол реакторларда масса алмасу тиімділігін есептеген кезде масштабты коэффициентін сипаттамасы. Ағындардың өзара әрекет ететін фазалардың арасындағы әртүрлі ара қатынасы бар аймақтарға реактордың бөлінуіне негізделген тәсіл. Есептелген өрнектерді масштабтау құбылыстарды ескере отырып биохимиялық реакторларды жобалау үшін қолданылуы мүмкін.

**Түйін сөздер:** биогазды реактор, жылу – масса алмасу, қалдықтар, ағындары, аймақ, математикалық модельдеу, масштабтау.

#### **Сведения об авторах:**

*Сахметова Гульмира Едиловна* - PhD докторант по специальности технологические машины и оборудование. Южно-Казахстанского государственного университета им. М. Ауэзова, Республика Казахстан. г. Шымкент;

*Бренер Арнольд Михайлович* - д.т.н., профессор. Южно-Казахстанского государственного университета им. М. Ауэзова, Республика Казахстан. г. Шымкент;

*Дильман Виктор Васильевич* - д.т.н., профессор. Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Российская Федерация. г. Москва;

*Балабеков Оразалы Сатимбекович* - д.т.н., Академик НАН РК. Южно-Казахстанского государственного педагогического института, Республика Казахстан. Шымкент;

*Ковалев Дмитрий Александрович* - К.т.н., Всероссийский научно-исследовательский институт сельского хозяйства, Российская Федерация. г. Москва.