
Л.Т. ТАШИМОВ

МЕТОДОЛОГИЯ РАСЧЕТА ХИМИЧЕСКИХ РЕАКТОРОВ С ОБРАЗОВАНИЕМ ДИСПЕРСНОЙ ФАЗЫ В РАБОЧЕЙ ЗОНЕ

Международный Казахско-Турецкий университет им. Яссауи

(Представлена академиком НАН РК М.Ж. Журиновым)

Разработана методология математического моделирования периодических реакторов с перемешиванием в условиях образования и осаждения нерастворимой твердой фазы в рабочей зоне. Описано распределение концентрации дисперсной твердой фазы по высоте периодического реактора с перемешиванием с учетом химической реакции образования дисперсной фазы и процесса осаждения взвеси и дана схема расчета времени пребывания реагентов в реакторе.

1 Концепция и общая схема расчета

В настоящее время использование химических аппаратов и реакторов с образованием, агрегацией и седиментацией нерастворимых фаз в рабочем объеме аппарата приобретает все более широкий характер, особенно в ряде современных технологических процессов. Известные теоретические модели процессов агрегации дисперсных фаз и их седиментации малопригодны для инженерных расчетов, т.к. слишком сложны и сопряжены с необходимостью использования трудноопределенных параметров, а типовые методы моделирования химических реакторов вообще не учитывают реальную динамику структуры потоков в аппарате, обусловленную образованием новых дисперсных фаз [1, 2].

Поэтому разработка методологии математического моделирования периодических реакторов с перемешиванием в условиях образования и осаждения нерастворимой твердой фазы в рабочей зоне является актуальной проблемой. В настоящей статье предлагаются возможные подходы к решению этой проблемы.

Особенность процесса в химическом реакторе с образованием нерастворимой фазы в рабочей зоне заключается в том, что в образующейся суспензии при перемешивании формируется продольный (т.е. по высоте аппарата) градиент концентрации твердой фазы, так называемая муть. По завершении процессов химических превращений кривая концентрации стабилизируется, что означает завершение первой стадии процесса.

Вторая стадия заключается в осаждении муты и формировании осадка. Время химических превращений и время осаждения в сумме определяют время пребывания реагентов в химическом аппарате.

Таким образом, при создании методики расчета должны быть решены следующие задачи:

1. Описано распределение концентрации дисперсной твердой фазы по высоте периодического реактора с перемешиванием с учетом химической реакции образования дисперсной фазы и процесса осаждения взвеси.

2. Разработана методика расчета времени пребывания реагентов в реакторе с учетом описанных эффектов.

Общий вид диффузационной модели реактора с перемешиванием в нашем случае запишем следующим образом [3]

$$D_{ef} \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - (f(\phi)W_{oc} - V) \frac{\partial C}{\partial z} + kA_0 \exp(-kt) = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (1)$$

Первое слагаемое в левой части описывает процесс перемешивания с эффективным коэффициентом диффузии, зависящим от гидродинамической структуры потоков в реакторе.

Второе слагаемое описывает процесс осаждения муты. Для упрощения инженерного расчета скорость осаждения рассчитывается для кластеров среднего порядка (и, соответственно, среднего размера) [4], а коэффициент, учитывающий фактор стесненности, $-f(\phi)$ может рассчитываться по известной методике [5] по полной концентрации кластеров всех порядков.

Третье слагаемое в левой части описывает интенсивность образования мономеров в процессе химических превращений.

Таким образом, для реализации заявленной программы расчета необходимо, помимо исходных данных, разработать подход к расчету эффективного коэффициента диффузии для модели (1)

Скорость стоксовского осаждения с учетом изменения среднего размера частиц при агрегации

$$W_{oc} = a^2 \left(1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \right)^2 \quad (2)$$

Уравнение модели для реакции псевдопервого порядка (т.е. при высокой концентрации разбавителя) [6]

$$D_{ef} \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + V \frac{\partial C}{\partial z} - a^2 \left(1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \right)^2 \frac{\partial C}{\partial z} + kA_0 \exp(-kt) = \frac{\partial C}{\partial t}. \quad (3)$$

Процесс образования суспензии в периодическом реакторе с мешалкой можно рассматривать в предположении Ван де Вюзе [3], т.е. в приближении существования изотропной турбулентности.

1. Уравнение диффузии запишем в виде:

$$Def \frac{\partial C_{sol}}{\partial z} - W_{sol} C_{sol} = I = C_l^0 \exp(-kt), \quad (4)$$

где $W_{sol} = W_{oc} - W_h$

Решение уравнения диффузии получаем в виде

$$C_{sol} = -\frac{Def C_l^0 \exp(-kt)}{W_{sol}} + C_{sol}(0) \exp\left(\frac{W_{sol} z}{Def}\right). \quad (5)$$

Средняя концентрация в реакторе по высоте

$$\bar{C}_{sol} = \frac{Def C_{sol}(0)}{W_{sol} H} (\exp(W_{sol} H / Def) - 1) - \frac{Def C_l^0}{W_{sol}} \exp(-kt). \quad (6)$$

Общая схема расчета на основании этой методики изложена в следующем разделе статьи.

2. Методика инженерного расчета реактора

I. Задаваемые исходные данные

1. Производительность реактора по целевому продукту – Q
2. Исходные реагенты и их стехиометрическое соотношение по технологии – А, В. Далее будем считать, что основная реакция протекает по первому или второму порядкам. Исходное состояние реагентов- жидкые растворы.
3. Условия проведения процесса – рассматривается изотермический периодический реактор с перемешиванием.
4. Концентрация растворов. Физико-химические характеристики: плотность, вязкость.
5. Габариты реактора (если они заданы)

II. Расчетные исходные данные

1. Расчет кинетических коэффициентов агрегации.
2. Расчет константы скорости химической реакции.
3. Расчет константы Гамакера [7] и постоянной агрегации по теории Дерягина-Ландау-Фервея-Овербека [7].

I. Расчет процесса агрегации в условиях протекания химической реакции по предложенным в работе моделям

1. Расчет элементов матрицы агрегации [8].
2. Расчет кинетики агрегации и построение кинетических кривых для эволюции кластеров по порядкам и общего числа кластеров нерастворимой фазы в условиях протекания реакции заданного порядка.

3. Расчет эволюции среднего порядка кластеров.

III. Расчет аппарата и времени пребывания в реакторе

1. Выбор типа химического реактора- предпочтителен реактор с коаксиальными цилиндрами в качестве перемешивающих устройств.
2. Предварительная оценка габаритов аппарата – диаметра и высоты рабочей зоны.
3. Выбор числа оборотов вращения цилиндров.
4. Расчет интенсивности и числа вихревых зон.
5. Расчет эффективного коэффициента диффузии.
6. Расчет кривых распределения дисперсной фазы по высоте аппарата на основе диффузионной модели.
7. Определение времени формирования кривой стабилизированного распределения.
8. Расчет времени осаждения мути в условиях агрегации
9. Проверка правильности выбора габаритов аппарата.
10. Пересчет, если он необходим.

Далее рассматривается пример расчета стадии осаждения мути в случае условного представления мути в виде двух фракций: мелкой и фракции агрегированных кластеров.

На рисунках 1, 2 приведены графики, иллюстрирующие изменение удельных количеств различных фракций в осадке в течение первого периода осаждения T_2 , т.е. до осаждения густой части суспензии.

После завершения первого периода осаждения в реакторе еще остается муть первой фракции в зоне высотой

$$H_1 = (W_2 - W_1)T_2 \quad (7)$$

$$Q_s/W_s$$

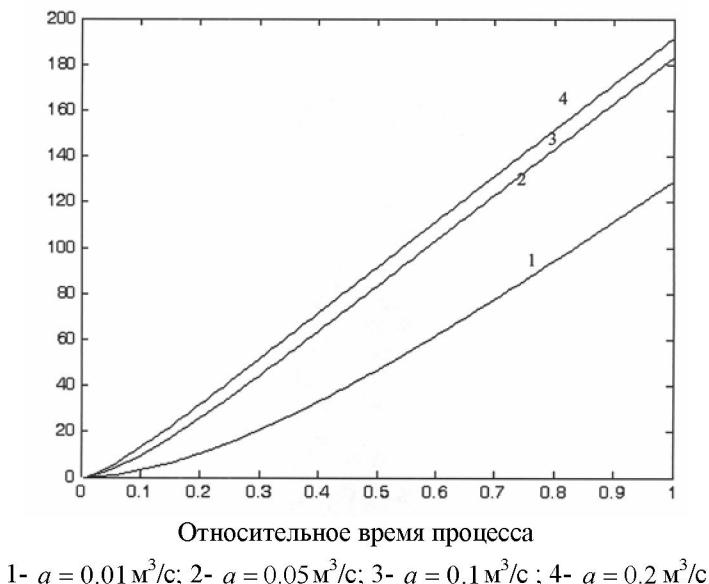


Рис. 1. Изменение приведенного количества осадка агрегированной фракции в течение первого периода осаждения

В этой зоне будет наблюдаться градиент плотности первой фракции. Этот градиент можно рассчитать из следующих соображений.

Т.к. $\rho_1(t) = \rho_{10} - \rho_3(t)$, то для учета временного запаздывания процесса седиментации в между фронтальными разделами можно записать

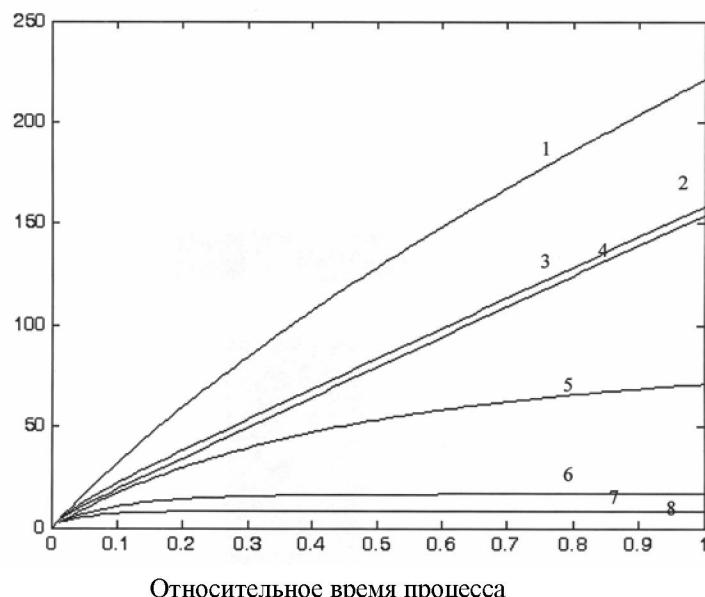
$$t = \frac{z}{W_2 - W_1}, \quad (8)$$

где z – текущая координата в направлении осаждения.

Тогда получаем выражение для расчета плотности мелкой фракции в зоне между фронтальными разделами

$$\rho_1(z) = \rho_{10} - \rho_3 \left(z / (W_2 - W_1) \right). \quad (9)$$

$$Q_{1;2} / W_{1;2}$$



Фракция 1: 1- $a = 0.01 \text{ м}^3/\text{с}$; 2- $a = 0.05 \text{ м}^3/\text{с}$; 3- $a = 0.1 \text{ м}^3/\text{с}$; 4- $a = 0.2 \text{ м}^3/\text{с}$
Фракция 2: 5- $a = 0.01 \text{ м}^3/\text{с}$; 6- $a = 0.05 \text{ м}^3/\text{с}$; 7- $a = 0.1 \text{ м}^3/\text{с}$; 8- $a = 0.2 \text{ м}^3/\text{с}$

Рис. 2. Изменение приведенного количества осадка исходных фракций в течение первого периода осаждения

Таким образом, представленная модель позволяет рассчитывать практически все основные характеристики процесса осаждения суспензии с учетом агрегации фракций.

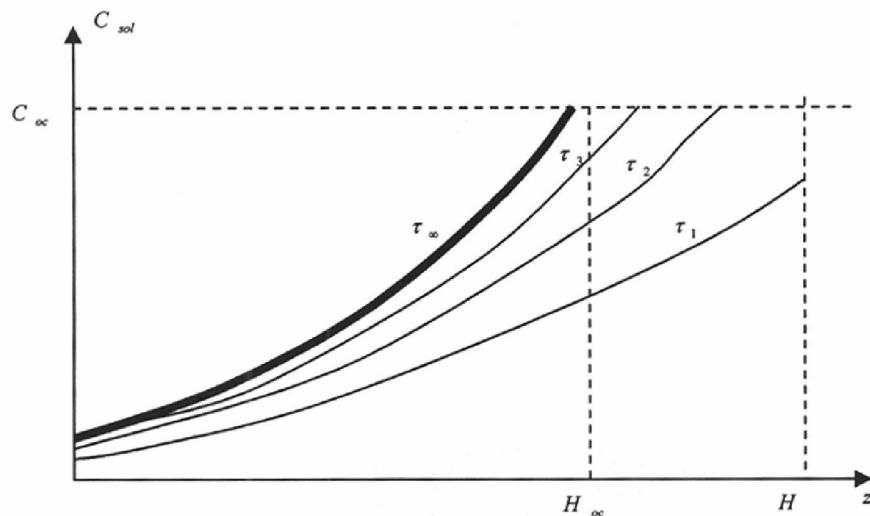


Рис. 3. Формирование стабилизированной кривой распределения дисперсной фазы.

Если реактор работает в периодическом режиме, то в процессе совместного протекания химических реакций, процессов агрегации и осаждения взвеси кривая распределения дисперсной фазы по высоте аппарата изменяется во времени. По истечении определенного периода формируется стабилизированная кривая распределения. Время формирования этой кривой и определяет необходимое время пребывания реагентов в реакторе. Этот процесс схематично показан на рисунке 3.

Результаты приложения изложенных научных разработок были использованы для выдачи рекомендаций по оптимальному выбору параметров и организации процесса при проектировании реконструируемой технологической линии на ТОО «Казфосфат» в схеме производства двойного суперфосфата с учетом кинетики образования и сепарации полидисперсной взвеси сульфата кальция в многосекционном экстракторе экстракционной фосфорной кислоты.

На основании анализа технологического регламента и с учетом теоретических разработок был предложен ряд изменений параметров технологического режима.

Ожидаемый экономический эффект в результате полномасштабного внедрения данной разработки составляет 14,3 млн. тенге, при производстве суперфосфата составил более 200 тыс.т/год.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бекаулова А.А., Ташимов Л.Т., Балабеков Б.Ч. Особенности моделирования химических реакторов с образованием дисперсной фазы в рабочей зоне //Научно-теоретический и практический журн. Оралдың гылым жаршысы. – 2009. – С. 83-88.
2. Jysoo Lee, Preben Alstrøm, and H.Eugene Stanley. Scaling of the Minimum Growth Probability for the “Typical” Diffusion-Limited Aggregation Configuration // Phys. Rev. Lett.-1989.-v.62, No 25.-P. 3013.
3. Ф. Стренк. Перемешивание и аппараты с мешалками. Л.: Химия, 1975, 384 с.
4. Бекаулова А., Ташимов Л.Т., Балабеков Б.Ч. Экспериментальные исследования фракционного состава суспензии при химическом осаждении из растворов //Вестник МКТУ им. А.Ясави. – Туркестан – 2009. – С.15-21.
5. Schwarzer S., Havlin Sh., Ossadnik P., Stanley H.E. Number of branches in diffusion-limited aggregates: The skeleton //Phys. Rev. E. -1996. – Vol. 53, № 2. – P. 1795-1804.
6. Witheridge Grant M., Wilkinson David L. Density measurement of particle and floc suspensions. J. Hydraui.Eng. – 1989. – 115, № 3. – С. 403-408.
7. Зонтаг Г., Штренге К. Коагуляция и устойчивость дисперсных систем.- Л.: Химия, 1973. – 152 .
8. Балабеков О.С., Бренер А.М., Бекаулова А.А. Влияние вида агрегационных ядер на решение уравнений агрегации в физико-химических системах // Доклады НАН РК. – 2008. №6. – С.35-39.

REFERENCES

1. Bekaulova A.A., Tashimov L.T., Balabekov B.Ch. *Oraldyn gylym zharshysy*. 2009, 83-88 (in Russ.).
2. Jysoo Lee, Preben Alstrom, and H.Eugene Stanley. *Phys. Rev. Lett.* 1989, 62, 25, 3013.
3. F. Strenk. *L. Khimiia*, 1975, 384 p. (in Russ.).
4. Bekaulova A., Tashimov L.T., Balabekov B.Ch. *Vestnik MKTU*, 2009, 15-21(in Russ.).
5. Schwarzer S., Havlin Sh., Ossadnik P., Stanley H.E. *Phys. Rev. E.*, 1996, 53, 2, 1795-1804.
6. Witheridge Grant M., Wilkinson David L. *J. Hydraui.Eng. ,* 1989, 115, 3, 403-408.
7. Zontag G., Shtrenge K. *Khimiia*, 1973, 152 (in Russ.).
8. Balabekov O.S., Brener A.M., Bekaulova A.A. *Doklady NAN RK*, 2008, 6, 35-39 (in Russ.).

Тәшиимов Л.Т.

ЖҰМЫС ЗОНАСЫНДАҒЫ ДИСПЕРСТИК ФАЗАНЫҢ ПАЙДА БОЛУЫНДАҒЫ ХИМИЯЛЫҚ РЕАКТОР ЕСЕБІНІҢ ӘДІСТЕМЕСІ

Периодты реакторлардың ерімейтін қатты фазасының жұмыс зонасындағы араластыру барысында пайда болуы және оның отыруының математикалық үлгісі қарастырылды. Осының нәтижесінде үдеріс өлшемінің отыруы және реагенттердің реактордағы болу уақытының өлшемі берілді.

Tashimov L.T.

METHODOLOGY OF CHEMICAL REACTORS CALCULATION WITH FORMATION OF THE DISPERSE PHASE IN THE WORKING ZONE

The methodology of mathematical modeling of periodic reactors under the conditions of formation and sedimentation of an insoluble solid phase in a working zone has been developed. Distribution of concentration of a disperse solid phase over the height of the periodic reactor allowing for chemical reactions of formation of a disperse phase and process of sedimentation of a suspension has been described and the scheme of calculation of time of stay of reagents in the reactor has been given too.