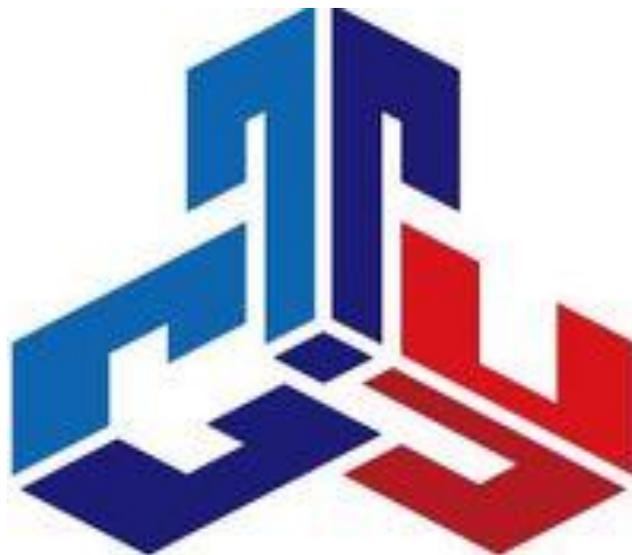


**СОВРЕМЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ**



**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ  
ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ**

**Учебное пособие**

**Рязань 2021**

УДК 519  
ББК 21.1  
М41

Математическое моделирование химико-технологических процессов:  
учебное пособие/ сост.Никитина С.Ю.,Ширяев А.Г., Фроловский М.Ю.  
Совр. техн. универ-т. – Рязань, 2021. – 78 с. – Электронное издание.

Рецензент: начальник ПТО ООО "Экотранс", к.т.н.,Никандров Г.А.

В пособии разобраны основные методы построения моделей  
основных процессов химических технологий..

Учебное пособие для студентов-бакалавров  
Современного технического университета

*Издается по решению Ученого Совета  
Современного технического университета*

УДК 519  
ББК 21.1  
М41

© С.Ю.Никитина,А.В. Никулин, А.Г. Ширяев  
© Современный технический университет, 2021

## Виды математических моделей.

Математическую модель сложной системы можно представить как функциональный оператор  $\Phi$ , преобразующий пространство вектора входных  $\vec{X}$ , внутрисистемных параметров процесса  $\vec{Z}$  и управляющих переменных  $\vec{U}$  в выходные параметры  $\vec{Y}$ .

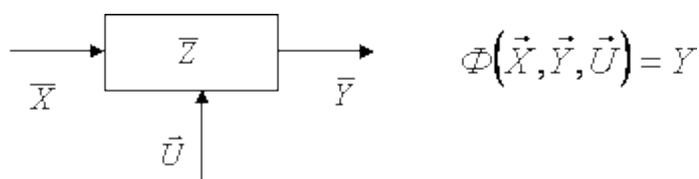


Рис.1 Объект моделирования.

Вид модели и степень ее детализации определяется не только свойствами моделируемого объекта, но и целью, с которой выполняется моделирование. Поэтому процесс разработки модели сложной системы состоит в последовательном анализе и моделировании отдельных ее подсистем с последующим установлением связей между этими подсистемами.

Процесс построения моделей можно представить следующим образом (рис.2):



Рис. 2 Процесс создания математических моделей.

На первом этапе создания модели выделяются признаки, характеризующие систему и системообразующие элементы, а также отношения, на которых реализуются эти признаки. Это позволяет определить исследуемый объект как систему.

На втором - определяется цель моделирования системы.

На третьем этапе на каждом уровне детализации разрабатываются математические модели и модели координаторов для взаимодействия между уровнями.

На первом уровне изучают интересующую систему (объект моделирования) и описывают ее содержательно. Такое описание называют концептуальной (содержательной) моделью, представляющей собой словесное описание математической формулировки задачи.

Затем формулируют концептуальную модель, для чего разрабатывают структуру модели. Это структурный или топологический уровень формирования модели, на котором модель записывается в виде балансовых соотношений и ограничений. Далее на алгоритмическом уровне разрабатывают алгоритм решения математической модели.

Программная реализация которого соответствует следующему уровню детализации – параметрическому, на котором определяются параметры модели.

И далее на последнем уровне проводится проверка адекватности модели моделируемому объекту.

**Различают два метода моделирования: аналитическое и имитационное.**

При **аналитическом** моделировании модель системы или ее элементов имеет вид функциональных зависимостей между входными, выходными и параметрами состояния системы. Это могут быть математические или логические функции, а модели могут иметь вид алгебраических, дифференциальных, интегро-дифференциальных уравнений или логических условий.

Исследования поведения системы или ее элементов по аналитическим моделям состоит в решении аналитически, либо численными методами

соответствующих уравнений и интерпретации полученных результатов.

Для аналитического моделирования характерно то, что процессы функционирования элементов системы записываются в виде функциональных соотношений (алгебраических, интегро-дифференциальных, конечно-разностных и т.п.) или логических условий.

Аналитическая модель может быть исследована следующим методами:

- аналитическим, когда стремятся получить в общем виде зависимости для искомых характеристик;
- численными, когда стремятся получить числовые результаты при конкретных начальных данных;
- качественными, когда имея решения в явном виде можно найти некоторые свойства решения (оценить устойчивость решения).

Однако аналитическое моделирование дает хорошие результаты в случае достаточно простых систем. В случае сложных систем требуется либо существенное упрощение первоначальной модели, чтобы изучить хотя бы общие свойства системы. Это позволяет получить ориентировочные результаты, а для определения более точных оценок использовать другие методы, например, имитационное моделирование.

При **имитационном** моделировании процесс функционирования исследуемого объекта воспроизводится на ЭВМ в отсутствие аналитических зависимостей между входными, выходными параметрами и параметрами состояния системы. По результатам имитационного моделирования на ЭВМ можно прогнозировать поведение исследуемой системы.

При имитационном моделировании процесс функционирования системы воспроизводится по времени, причем имитируются элементарные явления, составляющие процесс, с сохранением их логической структуры и последовательности протекания во времени, что позволяет по исходным данным получить сведения о состояниях процесса в определенные моменты времени, дающие возможность оценить характеристики системы.

Имитационные модели позволяют достаточно просто учитывать такие факторы, как наличие дискретных и непрерывных элементов,

нелинейные характеристики системы, многочисленные случайные воздействия и другие.

В настоящее время имитационное моделирование – наиболее эффективный метод исследования больших систем, включая задачи оценки: вариантов структуры системы, влияние изменения различных параметров системы.

Имитационное моделирование может быть положено в основу структурного, алгоритмического и параметрического синтеза больших систем.

Когда же результаты, полученные при воспроизведении на имитационной модели процесса функционирования системы, являются реализациями случайных величин и функций, то для нахождения характеристик процесса требуется его многократное воспроизведение с последующей статической обработкой информации. В этом случае в качестве метода машинной реализации имитационной модели следует использовать метод статического моделирования (метод Монте – Карло).

### **Классификация математических моделей.**

По отношению ко времени различают статические и динамические модели. Первые инвариантны ко времени, а вторые являются функцией времени.

По характеру зависимости выходных параметров от входных модели делятся на детерминированные и стохастические. Если существуют функциональные зависимости выходных параметров от входных, то модели являются детерминированными, если эти зависимости неизвестны, а известно лишь математическое описание выходов в виде функции входов, модели называются стохастическими.

По характеру времени динамические модели делятся на непрерывные и дискретные. Первые функционируют в непрерывном времени, а вторые - в дискретном. Примером непрерывных детерминированных моделей могут служить дифференциальные или интегро-дифференциальные уравнения; примером дискретных детерминированных моделей – конечные автоматы, дискретных стохастических – вероятностные автоматы.

Основные виды моделей представленные на рисунке 3.

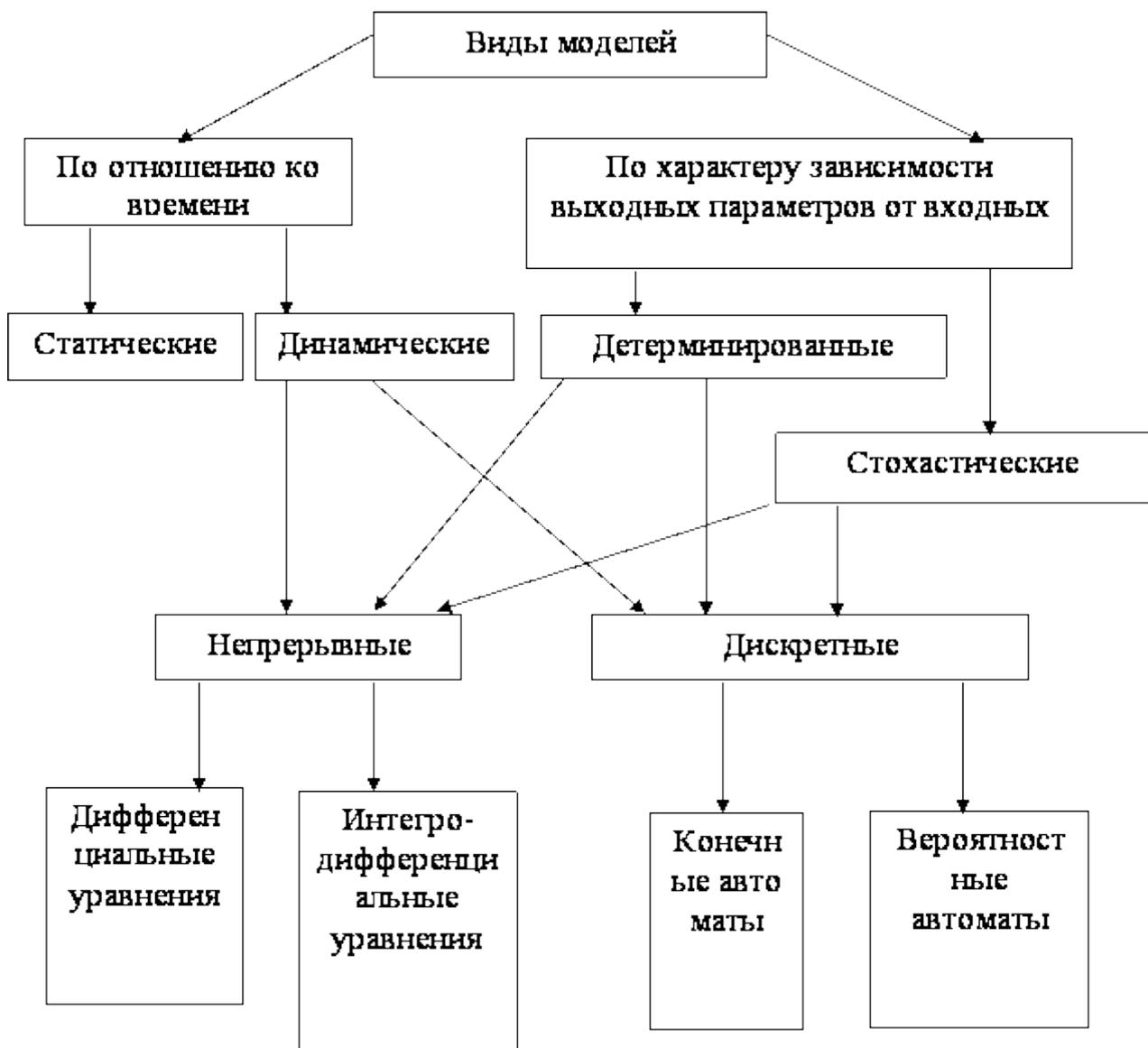


Рис. 3 Классификация математических моделей.

### Иерархическая структура моделей ГХТС.

Модели сложных систем иерархического типа формируются в соответствии с принципом модульности, заключающимся в том, что моделирование химико-технологических систем основано на относительной самостоятельности и независимости их подсистем, допускающих декомпозицию анализируемой системы на составляющие ее подсистемы и формирование их моделей.

В соответствии с принципом модульности моделирования сложных систем модель подсистемы каждого уровня иерархии формируется как объединение моделей нижележащего уровня, а процесс взаимодействия подсистем взаимодействующих уровней моделируется

с использованием координирующего соотношения. На рисунке 4 представлена иерархическая структура моделей ГХТС.

Согласно классическому модульному принципу моделирование сложных систем, предполагает формирование моделей подсистем каждого уровня иерархии как объединение модулей нижележащих уровней. Обобщенная модель гибкой ХТС должна включать в себя модели отдельных аппаратов и дополнительные условия, определяющие функционирования ХТС как целостной системы.

В свою очередь, модель аппарата представляется как совокупность моделей отдельных операций и координирующих условий.

Модель каждой операции – это система уравнений, описывающих множество физико-химических процессов, протекающих в системе в пределах каждой элементарной операции. Модель произвольного уровня  $L_j$  иерархии является объединением моделей  $M_i$  нижележащего уровня  $L_{j-1}$  и пересечением с координирующим соотношением  $C_{j-1,j}$  :

$$M(L_j) = \left\{ \left[ \bigcup_{i=1}^I M_i(L_{j-1}) \right] \cap C_{j-1,j} \right\}, \quad (1)$$

где  $I$  - число моделей нижележащего уровня иерархии.

Элементом гибкой ХТС является технологический аппарат периодического, непрерывного или полунепрерывного действия. Технологическая стадия в АПД есть упорядоченная последовательность технологических операций, каждая из которых представляет собой совокупность типовых физико-химических процессов.

Графически структуру модели технологической операции можно представить следующим образом (рис.5).

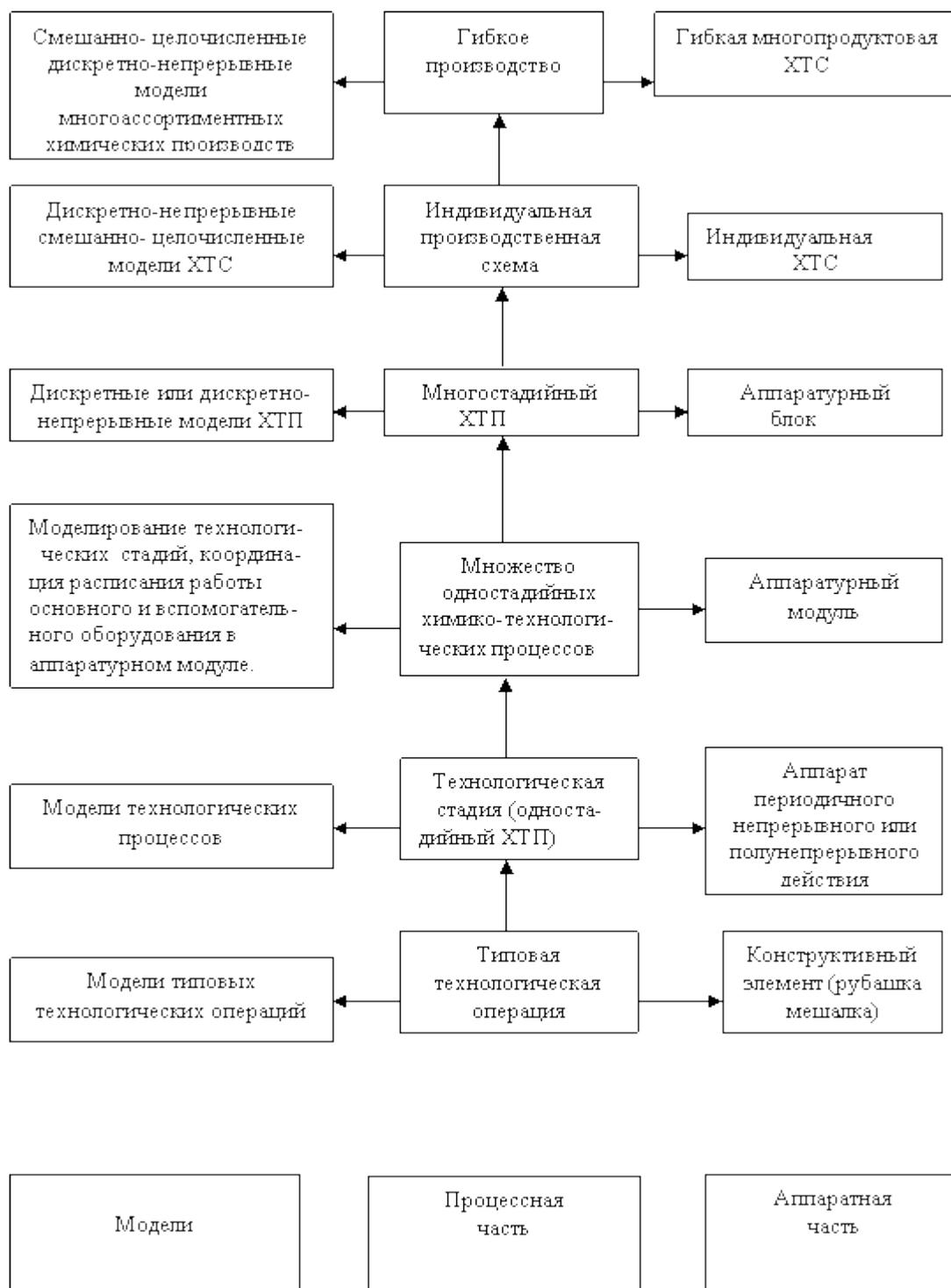


Рис. 4 Иерархическая структура моделей гибких ХТС.

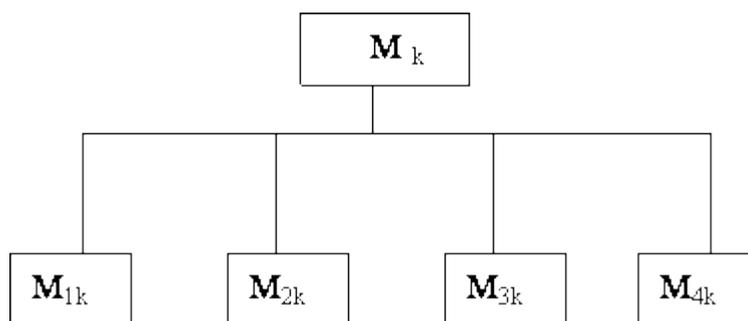


Рис. 5. Структурное представление модели технологической операции.

Здесь:  $M_k$ - модель технологической операции  $k$ ;

$M_{1k}$ - уравнения гидродинамики;

$M_{2k}$ - уравнения теплопередачи;

$M_{3k}$ - уравнения массопередачи;

$M_{4k}$ - уравнения химической кинетики.

Таким образом, модель  $M_k$  технологической операции  $k$  есть замкнутая система уравнений типовых процессов, что можно записать:

$$M_k = \bigcup_{p=1}^P M_{pk}; k=1, \dots, K \quad (2)$$

где  $M_{pk}$  – уравнение типового процесса  $p$  (гидродинамического, теплового, диффузионного, химического);

$P$  – число процессов, образующих данную технологическую операцию;

$K$  – число технологических операций, образующих цикл АПД.

Модель любой типовой технологической операции – это система дифференциальных и алгебраических уравнений с заданными начальными условиями, которые описывают гидродинамику, теплопередачу, массопередачу, химическую кинетику.

$$\begin{cases} dy / dt = f(x, y, \tau) & ; y(0) = y_0 \\ g(x, y, \tau) = 0 & , x(0) = x_0 \end{cases} \quad (3)$$

где  $y = \{y_1, y_2, \dots, y_N\}$ ;  $x = \{x_1, x_2, \dots, x_N\}$  – векторы зависимых переменных

$\tau$  – время

$f, g$  – известные векторные функции

Например, математическая модель химической реакции в аппарате периодического действия (АПД) имеет вид системы уравнений:

$$\begin{cases} dC_i / d\tau = f_i (r) , & i = 1...k \\ dT/d\tau = f_0 (C, r, \Delta H, T_0) \\ r-F (C, T) = 0 \end{cases} \quad (4)$$

где  $C_i, i = 1...k$  – концентрация реагентов и продуктов реакции

$k$  – число компонентов реакции

$r$  – скорость реакции

$\Delta H$  – тепловой эффект

$T_0$  – температура теплоносителя (или хладоагента)

$f_0, f_i (i = 1...k), F$  – известные функции

Из моделей технологических операций  $M_{kj}$ , имеющих конечную временную продолжительность и заканчивающихся некоторым состоянием аппарата, а также моделей  $\mu_j$  процесса их смены (т.е. смены состояний) и отображения, ставящего в соответствие множеству операций множество их моделей, формируется модель  $M_j$  технологического аппарата  $j$  периодического действия:

$$M_j = \left\{ \left[ \bigcup_{k=1}^K M_{kj} \right] \cup \mu_j \right\} \cup \varphi_{kj} ; j = 1, \dots, J_1; \varphi_{kj} : k_j \rightarrow M_{kj} , \quad (5)$$

где  $J_1$  – число АПД.

Модели аппаратов непрерывного и полунепрерывного действия, которые могут входить в состав гибкой ХТС наряду с аппаратами периодического действия, совпадают с моделями реализуемых в них процессов, которые в этом случае могут рассматриваться как единственная операция бесконечной продолжительности в АПД или продолжительности, равной технологическому циклу в АПНД.

Для  $i$ -ой ХТС, образованной  $J_1$  аппаратами периодического действия,  $J_2$  – АНД и  $J_3$  – АПНД модель  $M_i$  ХТС формируется из моделей этих

аппаратов  $M_j$ ;  $j=1, \dots, J$ , где  $J = \sum_{s=1}^3 J_s$ , моделей их взаимодействия  $v_i$  и отображения  $\psi_i$ , ставящего в соответствие множеству технологических аппаратов множество их моделей. А т.к. работа технологических аппаратов в системе должна быть согласована по времени, то в обобщенной модели системы должна содержаться модель расписания работы составляющих ее аппаратов  $\rho_i$ :

$$M_i = \left\{ \left[ \bigcup_{j=1}^J M_{ji} \right] \cup v_i \cup \rho_i \right\} \cup \psi_i \quad (6)$$

, где  $i=1, \dots, I$

где  $\psi_i : j\bar{i} \rightarrow M_{j\bar{i}}$ , I-число ХТС.

Здесь проявляется свойство эмерджентности системы, заключающееся в том, что модель системы не является простой совокупностью моделей образующих ее технологических аппаратов, а содержит также модели взаимодействия аппаратов, расписания их работы и отображения множества технологических аппаратов в множество их моделей. Таким образом, система приобретает новое качество, отсутствующее у отдельных аппаратов.

Гибкая ХТС многократно изменяет технологическую и организационную структуру, что обусловлено изменением номенклатуры и количества производимых ею продуктов; каждый раз, когда номенклатура и количество продуктов фиксируются, фиксируется и структура гибкой системы, которая в течение некоторого интервала времени, равного продолжительности производства продуктов этой номенклатуры, функционирует как индивидуальная или совмещенная с жесткой структурой.

Следовательно, модель гибкой системы  $M_i$  формируется из моделей  $M_{i\ell}$  подсистем, на которые она декомпозируется при фиксации номенклатуры продукции. Модели подсистем дополняются моделями модификации ее технологической  $\zeta_i$  и организационной  $\chi_i$  структур и отображением  $\xi_i$ , ставящим в соответствие каждой индивидуальной (или совмещенной) системе  $i\bar{i}$  ее модель  $M_{i\bar{i}}$ :

$$M_{i\ell} = \left\{ \left[ \bigcup_{j=1}^J M_{i\ell j} \right] \cup \zeta_{i\ell} \cup \chi_{i\ell} \right\} \cup \xi_{i\ell} \quad (7)$$

где  $\xi_l : i_l \rightarrow M_{il}$ .

В общем случае существует не единственный способ организации технологических процессов в гибкой системе, а множество вариантов ее технологической структуры, поэтому  $M_l$ ,  $\zeta_l$ ,  $\chi_l$  и функция  $\xi_l$  являются переменными, как и число моделей  $l$ .

**Задачи моделирования технологических операций: типовых периодических одностадийных и многостадийных процессов, индивидуальных, совмещенных и гибких ХТС.**

### 1. Типовая технологическая операция (ТТО)

Признаком ТТО является сохранение определенной закономерности ее протекания. В аппаратах периодического действия различают основные и вспомогательные технологические операции.

К *основным* относятся операции, в результате которых получается новый продукт или изменяется состав в системе или агрегатное состояние.

К *вспомогательным* операциям в аппаратах периодического действия относятся операции подготовки аппарата и его содержимого к проведению основных операций.

Основные операции могут прерываться вспомогательными операциями.

Например, к основным операциям относится химическое превращение, но в ходе химического превращения могут добавляться реагенты – это вспомогательные операции.

Спецификой моделирования ТТО при периодическом способе организации производства является наличие длительностей технологических операции ( $\tau_k$ ), где  $k$ -номер технологической операции.

Задача моделирования состоит в определении длительности  $k$ -ой технологической операции, с использованием математических моделей типовых технологических операций, которые будут рассмотрены в лекциях 6 – 8.

Технологические операции образуют технологическую стадию (технологический процесс) или технологический цикл работы аппарата периодического действия (АПД).

## 2. Технологический процесс или стадия в АПД.

Задача моделирования технологического процесса в АПД заключается в координации длительностей технологических операций в единое расписание работы аппарата периодического или полунепрерывного действия.

Изображается длительность технологического цикла ( $\tau_{ц}$ ) работы АПД в виде временных диаграмм Гантта (рис. 1) и определяется по соотношению (1).

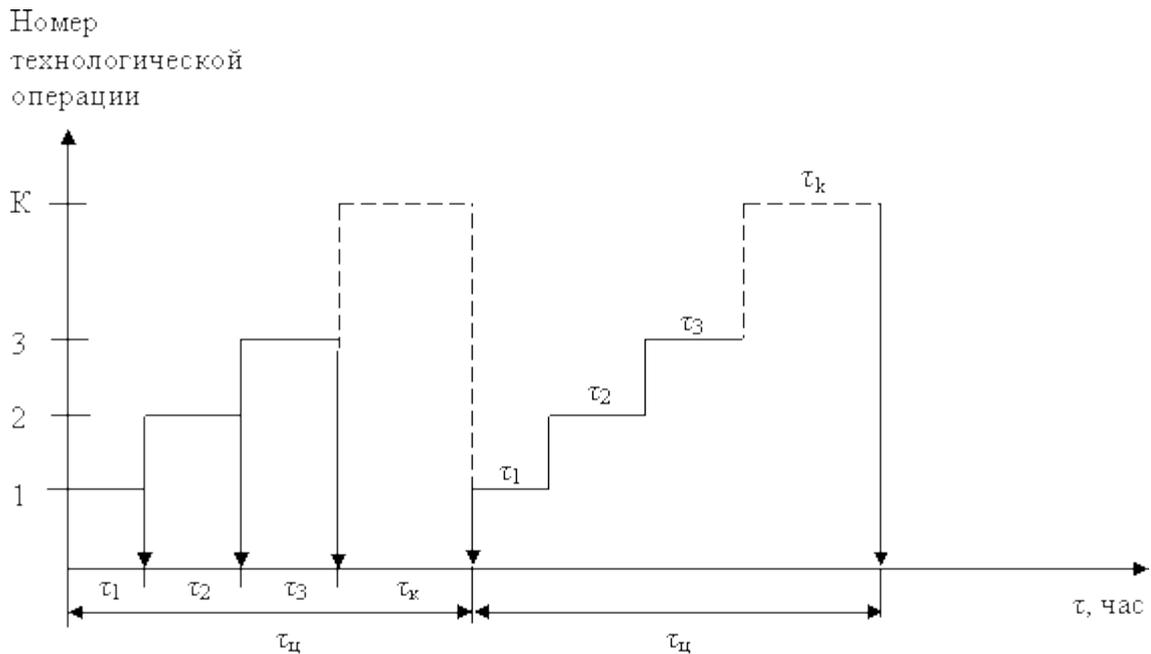


Рис. 1. Технологический цикл работы аппарата периодического действия

$$\tau_{ц} = \sum_{k=1}^K \tau_k \quad (1)$$

## 3. Одностадийный химико-технологический процесс (ХТП) реализуется в аппаратном модуле.

При моделировании одностадийного ХТП в аппаратном модуле одновременно составляется расписание работы аппарата периодического действия и определяются длительности технологических операций во вспомогательном оборудовании. Эти длительности согласовываются с расписанием работы в аппаратах периодического действия.

В общем случае они могут как оказать, так и не оказать влияние на длительность технологического цикла ( $\tau_{\text{ц.ам}}$ ) работы аппаратного модуля (рис. 2)

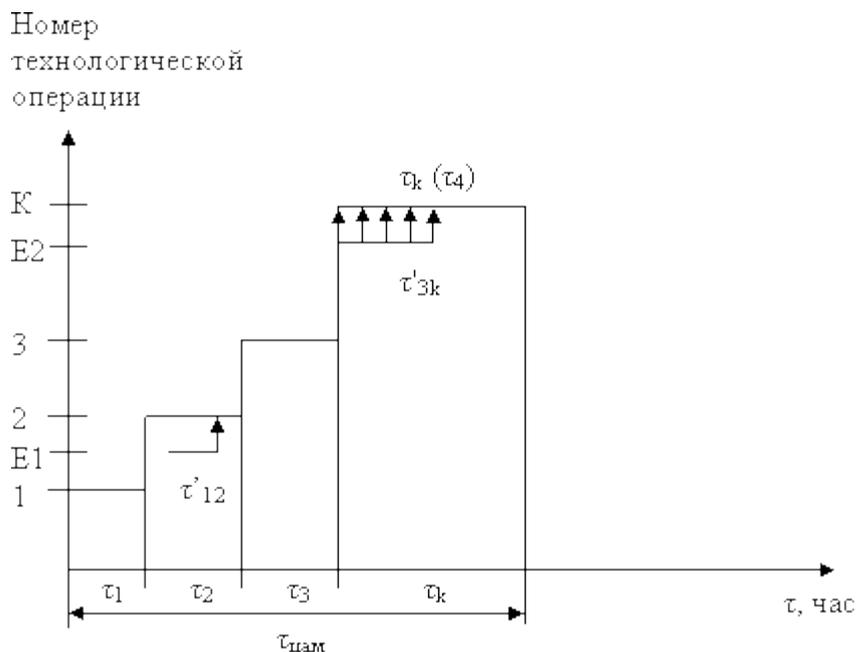


Рис. 2. Технологический цикл работы аппаратного модуля.

1,2,3,...,k – основные технологические операции, протекающие в основном аппарате периодического действия аппаратного модуля;

E1 и E2 – это вспомогательные операции, протекающие во вспомогательном оборудовании аппаратного модуля;

$\tau'_{12}$  – время подготовки реагента во вспомогательной емкости E1;

$\tau'_{3k}$  – время отбора полупродукта из емкости E2.

Здесь время подготовки реагента ( $\tau'_{12}$ ) не оказывает влияние на длительность технологического цикла работы АПД, так как вспомогательная операция протекает одновременно с основной операцией, а время отбора полупродукта ( $\tau'_{3k}$ ) - оказывает.

Длительность технологического цикла работы аппаратного модуля определяется:

$$\tau_{\text{ц.ам}} = \sum_{k=1}^k \tau_k + \sum_{j=1}^J \tau_j \quad (2)$$

где  $\tau_k$  – длительности основных технологических операций в аппаратном модуле;

$\tau_j$  – длительности технологических операций во вспомогательном оборудовании, влияющие на длительность цикла в аппаратном модуле (АМ). Для определения длительности  $\tau_j$  введем вспомогательную переменную  $\tau'_j$ :

$$\tau'_j = \max\{\tau_k^H, \tau_{k-1,k}^K\} \quad k = 2, \dots, K \quad (3)$$

где  $\tau_k^H$  – момент начала  $k$ -ой технологической операции;

$\tau_{k-1,k}^K$  – момент окончания вспомогательной операции, протекающей во времени между  $(k-1)$ -ой и  $k$ -ой основными операциями. Тогда:

$$\tau_j = \begin{cases} 0, & \text{если } \tau_j = \tau_k^H \\ \tau_{k-1,k}^K, & \text{если } \tau_j = \tau_{k-1,k}^K \end{cases} \quad (4)$$

#### 4. Многостадийная химико-технологическая система (ХТС).

Модель многостадийной ХТС наряду с моделями одностадийных ХТС, протекающих в аппаратурных модулях, должна включать расписание работы многостадийной ХТС (см. рис. 3).

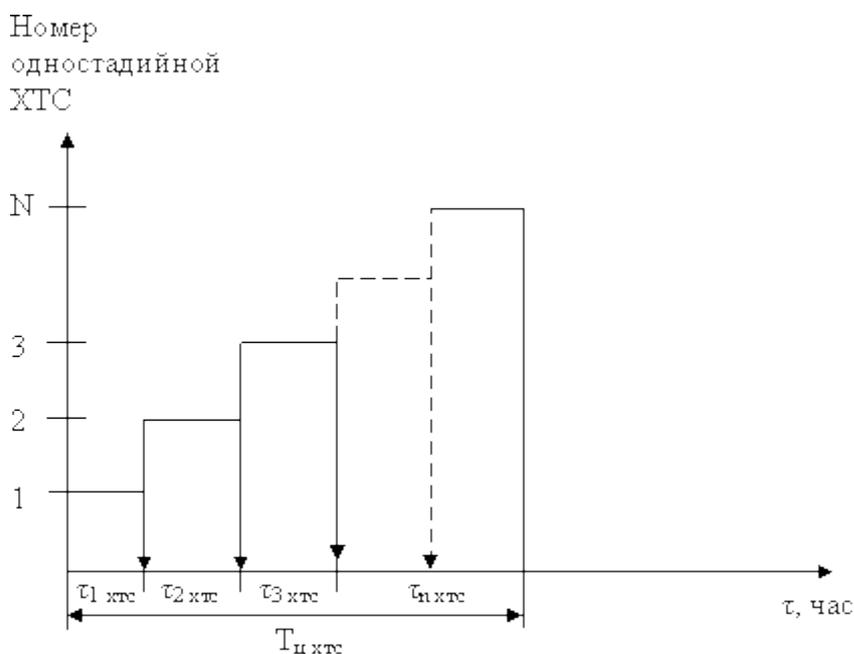


Рис. 3. Технологический цикл работы многостадийной ХТС.

$\tau_{1 \text{ хтс}}$  – длительность технологического цикла работы одностадийной ХТС

$\tau_{2 \text{ хтс}}$  – длительность технологического цикла работы одностадийной ХТС 2

-----  
 $\tau_{n \text{ хтс}}$  – длительность технологического цикла работы одностадийной ХТС n

$T_{\text{ц хтс}}$  – время цикла работы многостадийной ХТС определяется по соотношению:

$$T_{\text{ц хтс}} = \sum_{n=1}^N \tau_{n \text{ хтс}} \quad (5)$$

Где  $N$  – количество одностадийных ХТС, включенных в состав многостадийной ХТС.

Задача моделирования многостадийной ХТС заключается в том, чтобы согласовать длительности работы одностадийных ХТС в общее расписание работы многостадийной ХТС.

На рис. 3 представлен простейший вариант технологической структуры без согласующих емкостей.

### 5. Индивидуальная технологическая схема.

Рассмотрим 2 варианта организации структур индивидуальных технологических схем.

*Первый* – последовательное соединение аппаратных блоков (АБ) в индивидуальную ХТС, предназначенную для реализации в них многостадийных химико-технологических процессов (ХТП).

Вариант блочно-модульной организации технологической структуры индивидуальной ХТС представлен на рис. 4, а организационной структуры – на рис. 5.

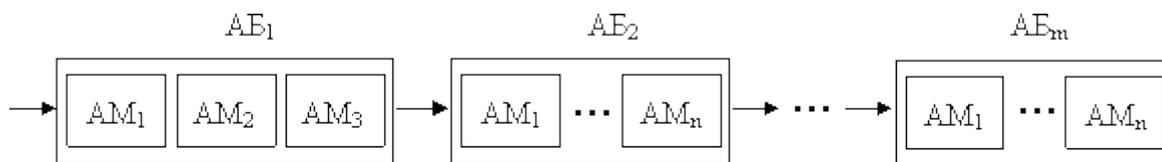


Рис. 4. Блочнo-модульная организация индивидуальной ХТС без согласующих емкостей

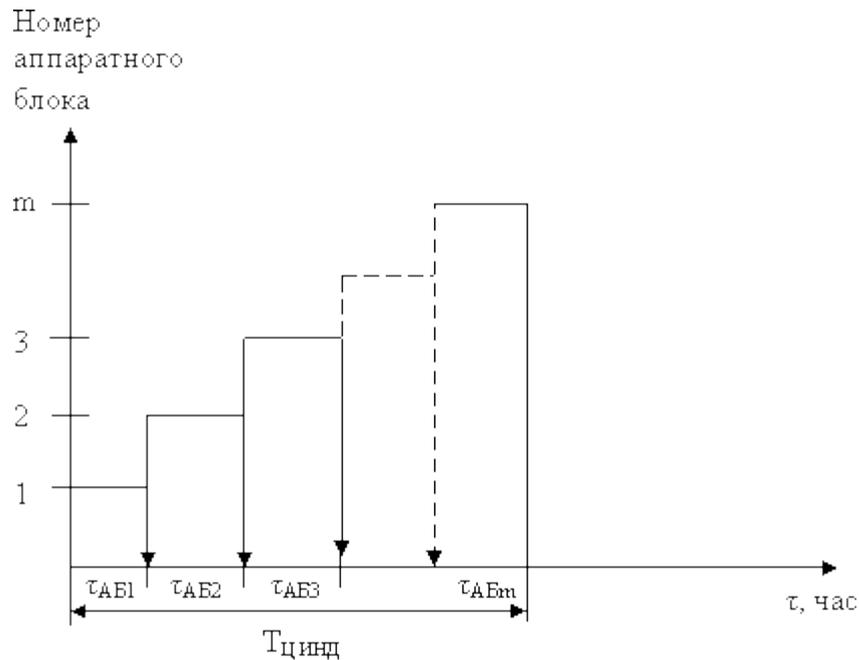


Рис. 5. Длительность технологического цикла работы индивидуальной ХТС.

Длительность технологического цикла работы индивидуальной ХТС (см. рис. 5) складывается из длительностей технологических циклов работы аппаратных блоков ( $\tau_{ABm}$ ).

$$T_{\text{цикл}} = \sum_{m=1}^M \tau_{ABm} \quad (6)$$

Постановка задачи (6) соответствует случаю наработки продукта одной партией в полном объеме.

*Второй* вариант организации структуры индивидуальной ХТС - объединение аппаратных блоков в индивидуальную схему через согласующие емкости (рис. 6).

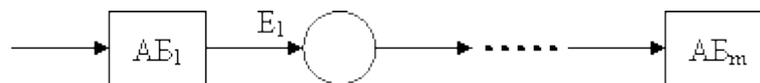


Рис. 6. Блочная-модульная технологическая структура индивидуальной ХТС с согласующимися емкостями.

Установка емкости между блоками необходима в двух случаях:

- для согласования материальных потоков;
- для согласования расписания работы двух соседних блоков в единое расписание.

Рассмотрим 2 случая установки емкости для согласования материальных потоков, если производительности аппаратных блоков 1 и 2 существенно отличаются.

### 1 случай

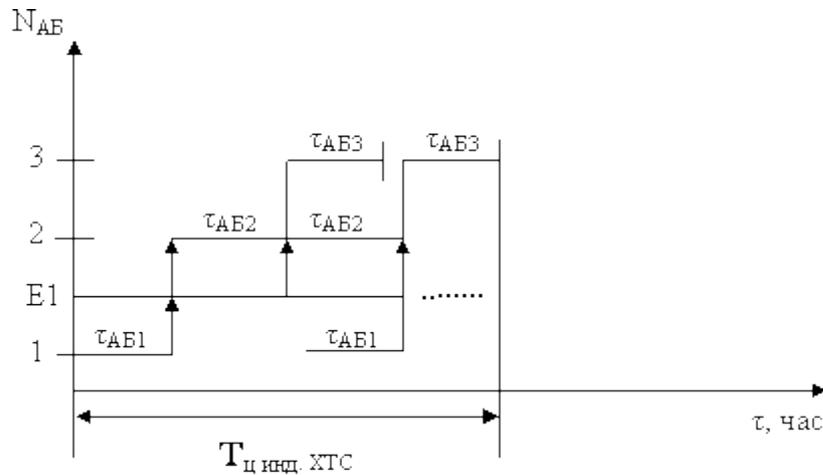


Рис. 7. Длительность технологического цикла работы индивидуальной XTC с согласующей емкостью ( $Q_{AB1} > Q_{AB2}$ ).

Пусть  $Q_{AB1}$ ,  $Q_{AB2}$  – производительности аппаратных блоков AB1 и AB2 (кг/ч, т/год) ( $m^3/сутки$ )

Первый случай соответствует большей производительности первого блока по сравнению со вторым:  $Q_{AB1} > Q_{AB2}$ . В этом случае емкость нужна для хранения наработанной в аппаратном блоке 1 реакционной массы и последующей загрузки порциями в аппаратный блок 2, который будет являться лимитирующим блоком (см. рис. 7).

$$T_{цикл. XTC} = \tau_{AB1} + n_{AB2} * \tau_{AB2} + \tau_{AB3} \quad (7)$$

где  $n_{AB2}$  – число порций, которые будут перерабатываться в AB2, за весь производственный цикл работы блока.

$$n_{AB2} = \frac{Q_{AB2}}{q_{AB2}}$$

где  $q_{AB2}$  – размер партии, нарабатываемый за 1 технологический цикл работы блока AB2 (кг/час).

В общем случае длительность технологического цикла работы индивидуальной XTC определяется по соотношению:

$$T_{\text{цикл хтс}} = \sum_{m=1}^{l-1} \tau_{\text{АБ}m} + n_1 * \tau_1 + \sum_{m=l+1}^M \tau_{\text{АБ}m} \quad (8)$$

где

$$\tau_1 = \max_{m=1, \dots, M} \{ \tau_m \} \quad (9)$$

$l$  – лимитирующая стадия;

$\tau_1$  – длительность лимитирующей стадии;

$\tau_{\text{АБ}m}$  – длительность технологической стадии в  $m$ -ом аппаратурном блоке.

В соотношении (8) первое слагаемое – сумма длительностей технологических стадий в “ $m$ ” аппаратурных блоках до стадии, предшествующей лимитирующей;

второе слагаемое – длительность лимитирующей стадии в  $l$  – ом аппаратурном блоке, с учетом числа порций, перерабатываемых в нем за весь производственный цикл;

третье слагаемое – сумма длительностей стадий в аппаратурных блоках после лимитирующего.

Таким образом, длительность цикла работы индивидуальной ХТС, включающей согласующие емкости для случая, когда производительности аппаратов на передающих блоках больше, чем на принимающих, определяется как сумма длительностей технологических стадий в блоках до лимитирующего блока, длительности лимитирующей квазистадии, умноженной на количество порций, переработанных в лимитирующем блоке, и сумма длительностей технологических стадий в блоках после лимитирующего.

## 2 случай

Производительность передающего блока меньше принимающего  $Q_{\text{АБ}1} < Q_{\text{АБ}2}$ . В этом случае необходимо наработать в первом блоке реакционную массу и подать на переработку во второй блок (см. рис. 8). Для хранения реакционной массы, наработанной в первом аппаратурном блоке служит емкость  $E1$ .

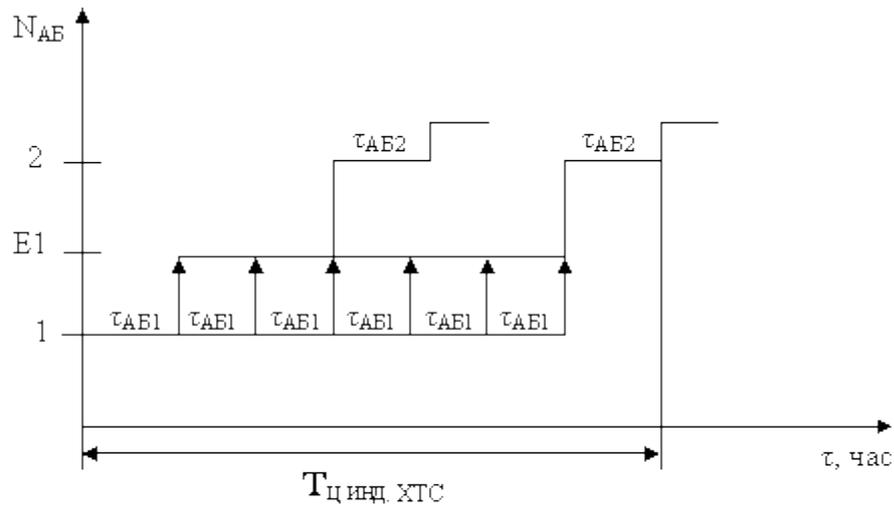


Рис. 8. Длительность технологического цикла работы индивидуальной ХТС с согласующей емкостью ( $Q_{AB1} < Q_{AB2}$ ).

Лимитирующим будет являться первый блок АБ1

$$T_{Ц \text{ инд. хтс}} = n_{AB1} * \tau_{AB1} + \sum_{m=2}^M \tau_{ABm} \quad (10)$$

В общем случае

$$T_{Ц \text{ инд. хтс}} = \sum_{m=1}^{l-1} \tau_{ABm} + n_1 * \tau_1 + \sum_{m=l+1}^M \tau_{ABm} \quad (11)$$

где длительность лимитирующей стадии определяется по соотношению (9).

Соотношение (11) аналогично соотношению (8)

## 6. Задачи моделирования гибких (совмещенных) ХТС

Задачи моделирования гибкой (совмещенной) схемы включают: моделирование индивидуальных схем, образующих ее; составление расписания работы гибкой (совмещенной) ХТС для выбранного способа наработки ассортимента.

### **Специфические особенности моделирования гибкой (совмещенной) схемы.**

1. Выбор общего аппарата на стадии ( $V_j$ ) для реализации в нем технологических процессов выпуска многоассортиментной продукции ( $i = 1, \dots, N$ ). Пусть на  $j$ -той технологической стадии планируется выпуск ассортимента продукции  $i=1, \dots, N$  и для каждого продукта в

процессе моделирования схемы определяется требуемый объем аппарата:

$V_{j1}$  – требуемый объем аппарата для продукта 1 на стадии  $j$

$V_{j2}$  – требуемый объем аппарата для продукта 2 на стадии  $j$ .

·

$V_{ji}$  – требуемый объем аппарата для  $i$ -ого продукта на  $j$ -ой стадии

·

$V_{jn}$  – требуемый объем аппарата для продукта  $n$  на стадии  $j$

Необходимо выбрать общий аппарат на стадии  $j$ . Графическая иллюстрация выбора общего аппарата представлена на рис. 9.

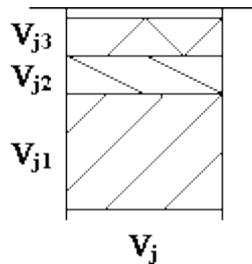


Рис. 9. Графическая иллюстрация выбора общего аппарата

На рис. 9 разными обозначениями показаны реальные объемы заполнения аппарата  $V_j$  продуктами 1, 2, 3 ( $V_{j1}$ ,  $V_{j2}$ ,  $V_{j3}$  – соответственно).

$$V_j = \max_{i=1..N} \{V_{ji}\} \quad (12)$$

Выбор из условия (12) приведет для некоторых продуктов ассортимента к неэффективному использованию объема аппарата, поверхности теплопередачи в виду низких реальных коэффициентов заполнения.

По технологическому регламенту для каждого типового технологического процесса заданы верхний и нижний коэффициенты заполнения типового оборудования, как правило, для большинства аппаратов они изменяются от  $0,3 \div 0,7$ .

Размер партии для  $i$ -го продукта зависит от объема аппарата на  $j$  – той стадии ( $V_{ji}$ ) и верхнего ( $\varphi_{ji}$ ), нижнего ( $\varphi_{ji}$ ) коэффициента заполнения для  $i$  – го продукта в  $j$  – ом аппарате. Минимальный и максимальный размеры партии для каждого продукта определяются с учетом коэффициента заполнения.

$$q_{\bar{v}}^{\min} = \frac{V_{j^i} \cdot \underline{\varphi}_{\bar{v}}}{S_{\bar{v}}} \quad (13)$$

$$q_{\bar{v}}^{\max} = \frac{V_{j^i} \cdot \overline{\varphi}_{\bar{v}}}{S_{\bar{v}}} \quad (14)$$

Где  $S_{ij}$  – постадийный материальный индекс (л/кг, м<sup>3</sup>/кг).

В этой связи объем аппарата на стадии для каждого продукта должен меняться по соотношению:

$$\frac{q_{\bar{v}} \cdot S_{\bar{v}}}{\underline{\varphi}_{\bar{v}}} \leq V_{j^i} \leq \frac{q_{\bar{v}} \cdot S_{\bar{v}}}{\overline{\varphi}_{\bar{v}}} \quad (15)$$

где  $q_{ij}$  – размер партии продукта.

А общий аппарат на стадии  $V_j$  следует выбирать из условия:

$$\max \left\{ \frac{q_{\bar{v}} \cdot S_{\bar{v}}}{\underline{\varphi}_{\bar{v}}} \right\} \leq V_j \leq \min \left\{ \frac{q_{\bar{v}} \cdot S_{\bar{v}}}{\overline{\varphi}_{\bar{v}}} \right\} \quad (16)$$

Длительность технологической стадии для  $i$ -го продукта в  $j$  – ом аппарате зависит от размеров партии  $i$ -го продукта ( $q_i$ )

$$\tau_{ij} = f(q_i) \quad (17)$$

При моделировании стадии в гибкой ХТС необходимо оценить изменения длительности технологической стадии (соотношение (17)) в выбранном аппарате ( $V_j$ ) для продукта ( $i$ ), в зависимости от размера партии ( $q_i$ ). Это изменение определяется в результате моделирования по моделям типовых технологических стадий и операций.

## 2. Согласование работы индивидуальных ХТС в единое расписание работы гибкой схемы.

Если на схеме продукты нарабатываются последовательно в полном объеме, то длительность технологического цикла работы гибкой (совмещенной) схемы определяется как сумма длительностей технологических циклов индивидуальной ХТС ( $\tau_{ц\ ХТСi}$ ).

$$T_{цгхтс} = \sum_{i=1}^N \tau_{цхтсi} \quad (18)$$

Где

$$\tau_{цхтсi} = \sum_{j=1}^M \tau_{jхтсi} \quad (19)$$

$\tau_{jхтсi}$  - длительности  $j$ -ых технологических стадий в индивидуальных ХТС для выпуска  $i$ -го продукта.

На рис. 10 представлена диаграмма Гантта, иллюстрирующая длительность технологического цикла работы гибкой (совмещенной) ХТС, формируемой из длительностей работы индивидуальных ХТС по выпуску двух продуктов, выпускаемых последовательно.

Если наработка ассортимента на гибкой схеме проводится по одной партии каждого продукта, то необходимо решать задачу составления расписания работы отдельных аппаратов ХТС, то есть проверять по каждому аппарату возможность выпуска на нем продукта в заданной последовательности (рис. 11).

Задачи моделирования работы гибкой ХТС при наработке ассортимента по одной партии заключаются: в составлении расписания работы одного из выбранных вариантов наработки продуктов; анализе структурных изменений и определении минимального количества емкостей и минимального времени наработки ассортимента.

В этом случае для согласования расписания работы отдельных аппаратов в единое расписание работы ХТС требуется установка согласующих емкостей.

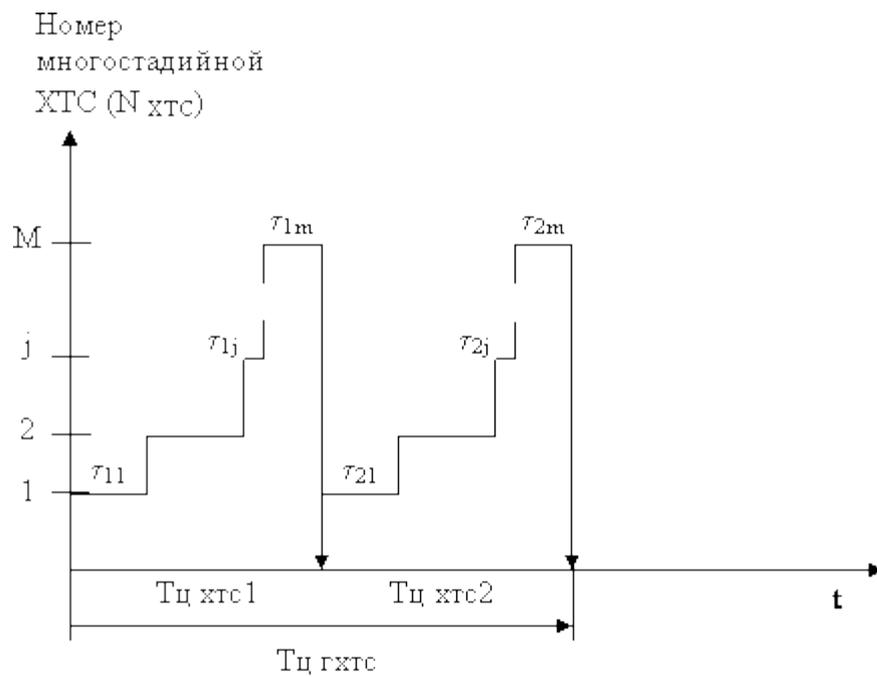


Рис. 10. Длительность технологического цикла работы гибкой (совмещенной) ХТС.

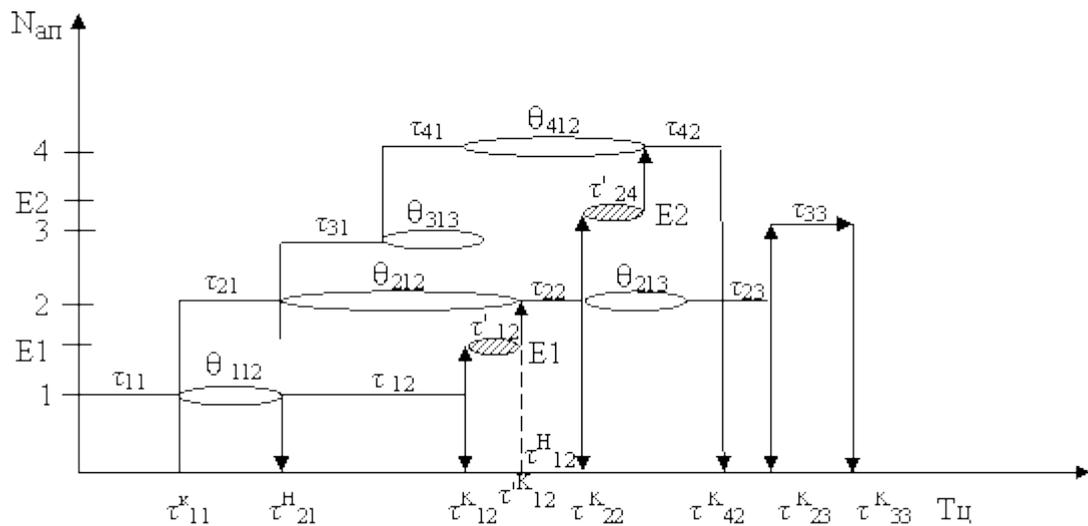


Рис. 11. Графическая иллюстрация наработки ассортимента по одной партии.

- - длительность обработки продукта
- - длительность переналадки
- ▨ - длительность хранения реакционной массы в емкости

Пусть заданы маршруты обработки трех продуктов на 4 аппаратах:

$$G1 = \{1, 2, 3, 4\}$$

$$G2 = \{1, 2, 4\}$$

$$G3 = \{2, 3\}$$

И матрицы:  $\tau_{j,i}$  – длительности обработки  $i$ -го продукта на  $j$ -ом аппарате;  $\Theta_{j,i-1,i}$  – длительности переналадки с выпуска  $(i-1)$ -го на  $i$ -й продукт на  $j$ -ом аппарате (где  $i=2, \dots, N$ ).

Продукты выпускаются последовательно: первый ( $i=1$ ), второй ( $i=2$ ), третий ( $i=3$ ).

Для любого продукта, кроме первого, время начала его выпуска на последующем аппарате в маршруте его обработки ( $j$ ) или ( $j'$ ) будет определяться максимальным значением из времени окончания наработки данного продукта ( $i$ ) на предыдущем аппарате ( $j-1$ ) и временем окончания наработки предыдущего продукта в последовательности  $(i-1)$  на данном аппарате ( $j$ ) или следующем аппарате в маршруте обработки ( $j'$ ) для продукта ( $i$ ) ( $j'=(j+1), \dots, M$ ) с учетом переналадки этого аппарата.

Общий вид выражений для определения времени начала выпуска продуктов ассортимента представлен соотношениями (20.1) и (20.2).

$$\tau_{j,i}^H = \max\{\tau_{j-1,i}^K, (\tau_{j,i-1}^K + \Theta_{j,i-1,i})\} \quad i = 2, \dots, N; j = 2, \dots, M \quad (20.1)$$

или

$$\tau_{j,i}^H = \max\{\tau_{j-1,i}^K, (\tau_{j',i-1}^K + \Theta_{j',i-1,i})\} \quad i = 2, \dots, N; j' = j+1, \dots, M \quad (20.2)$$

Время окончания выпуска  $i$ -го продукта на  $j$ -ом аппарате будет определяться как сумма момента (времени) окончания выпуска предыдущего продукта ( $i-1$ ) на  $j$ -ом аппарате с учетом его переналадки и длительности обработки  $i$ -го продукта на  $j$ -ом аппарате

$$\tau_{j,i}^K = \tau_{j,i-1}^K + \Theta_{j,i-1,i} + \tau_{j,i} \quad i = 2, \dots, N; j = 2, \dots, M \quad (21.1)$$

$\tau_{j,i}^K, \tau_{j,i-1}^K$  – моменты окончания выпуска  $i$ -го и  $(i-1)$ -го продуктов на  $j$ -ом аппарате.

В случае если  $(i-1)$ -й продукт не выпускался на  $j$ -ом аппарате до  $i$ -го продукта время окончания выпуска  $i$ -го продукта на  $j$ -ом аппарате равно:

$$\tau_{j,i}^K = \tau_{j,i}^H + \tau_{j,i} \quad (21.2)$$

Необходимость установки согласующей емкости для выпуска  $i$ -го продукта между  $(j-1)$ -ым и  $j$ -ым аппаратом или следующим аппаратом ( $j'$ ) в маршруте его обработки, (где  $j'=j+1 \vee j'=j+2 \vee \dots \vee j'=M$ ) определяется из условия

$$\tau_{j-1,i}^K < \tau_{j,i}^H ; i = 1, \dots, N; j = 2, \dots, M \quad (22.1)$$

или

$$\tau_{j-1,i}^K < \tau_{j',i}^H ; i = 1, \dots, N; j' = j+1, \dots, M \quad (22.2)$$

Если выполняется одно из условий (22.1) или (22.2), то необходимо установить емкость между  $(j-1)$ -м и  $j$ -м аппаратами для хранения  $i$ -го продукта.

Так, для представленной на рис. 11 диаграммы Гантта время начала выпуска 2-го продукта на 2-м аппарате определяется по формуле (20.1).

$$\tau_{22}^H = \max\{\tau_{12}^K, (\tau_{21}^K + \Theta_{212})\};$$

$\tau_{12}^K, \tau_{21}^K$  – моменты окончания выпуска  $i$ -го продукта на  $j$ -ом аппарате. Время окончания выпуска 2-го продукта на 1-ом аппарате определяется по формуле (21.1):

$$\tau_{12}^K = \tau_{11}^K + \Theta_{112} + \tau_{12} ,$$

Так как  $\tau_{12}^K < \tau_{22}^H$  (выполняется условие (22.1)), то для хранения реакционной массы 2-го продукта требуется емкость  $E1$ . Время хранения реакционной массы в емкости при передаче  $i$ -го продукта с  $(j-1)$ -го на  $j$ -ый или  $j'$ -ый аппарат определяется как максимальное из времени окончания выпуска  $i$ -го продукта на предыдущем аппарате ( $j-1$ ) и времени окончания выпуска предыдущего продукта ( $i-1$ ) на данном ( $j$ -ом или  $j'$ -ом) аппарате с учетом его переналадки за вычетом момента окончания выпуска  $i$ -го продукта на  $(j-1)$ -ом аппарате.

$$\tau'_{j-1,j} = \max \left\{ \tau_{j-1,i}^K, \left( \tau_{j,i-1}^K + \Theta_{j,i-1,i} \right) \right\} - \tau_{j-1,i}^K, \\ i = 2, \dots, N; \\ j = 2, \dots, M \quad (23.1)$$

$$\tau'_{j-1,j} = \max \left\{ \tau_{j-1,i}^K, \left( \tau_{j',i-1}^K + \Theta_{j',i-1,i} \right) \right\} - \tau_{j-1,i}^K, \\ i = 2, \dots, N; \\ j' = j + 1, \dots, M \quad (23.2)$$

Так, для рассматриваемого примера (см. рис. 11). Время хранения реакционной массы в емкости E1 -  $\tau'_{12}$  определяется по соотношению (23.1):

$$\tau'_{12} = \max \left\{ \tau_{12}^K, \left( \tau_{21}^K + \Theta_{212} \right) \right\} - \tau_{12}^K$$

Время начала выпуска 2-го продукта на 4-м аппарате определяется по соотношению (20.2).

$$\tau_{42}^H = \max \left\{ \tau_{22}^K, \left( \tau_{41}^K + \Theta_{412} \right) \right\}$$

Время окончания выпуска 2-го продукта на 4-м аппарате определяется по соотношению (21.1).

$$\tau_{42}^K = \left( \tau_{41}^K + \Theta_{412} \right) + \tau_{42}$$

Так как  $\tau_{22}^K < \tau_{42}^H$  – выполняется условие (22.2), то для 2-го продукта в маршруте его обработки при переходе его выпуска со 2-го аппарата на 4-ый необходимо установить емкость E2 для хранения продукта.

Время хранения реакционной массы в емкости E2 определяется по соотношению (23.2)

$$\tau'_{24} = \max \left\{ \tau_{22}^K, \left( \tau_{41}^K + \Theta_{412} \right) \right\} - \tau_{22}^K$$

Время начала выпуска 3-го продукта на 3-ем аппарате (см. рис.11.) определяется по соотношению (20.1)

$$\tau_{33}^H = \max \left\{ \tau_{23}^K, (\tau_{31}^K + \Theta_{313}) \right\}$$

А время окончания выпуска 3-го продукта на 3-ем аппарате определяется по соотношению (21.2).

Так как  $\tau_{23}^K = \tau_{33}^H$ , то есть условие (22.2) не выполняется, то емкость для хранения реакционной массы для 3-го продукта при передаче его со 2-го на 3-й аппарат не требуется.

Таким образом, в рассмотренном примере (см. рис. 11) в результате моделирования определена необходимость установки двух согласующих емкостей (E1 и E2) для согласования потоков во времени.

Определение минимального количества емкостей и минимального времени наработки ассортимента продукции проводится путем варьирования последовательностей выпуска продуктов. В результате получают разные варианты структур гибкой схемы, из которых необходимо выбрать оптимальный вариант по времени наработки ассортимента и по затратам на оборудование.

Длительность цикла наработки ассортимента по одной партии на гибкой схеме определяется как максимальное значение из времен окончания выпуска последнего в последовательности продукта ( $n'$ ) и предпоследнего продукта ( $n'-1$ ) на последнем аппарате в маршрутах их обработки ( $m'_{(n')}$ ) или ( $m'_{(n'-1)}$ ):

$$T_{Ц} = \max \left\{ \tau_{n'-1}^K, m'_{(n'-1)}, \tau_{n'}^K, m'_{(n')} \right\} \quad (24)$$

В рассмотренном примере (см. рис. 11)

$$T_{Ц} = \max \left\{ \tau_{33}^K, \tau_{42}^K \right\} = \tau_{33}^K$$

Такой выпуск можно организовать при малотоннажном производстве.

При последовательной наработке ассортимента на гибкой схеме организация выпуска аналогична рассмотренной для совмещенной схемы. Для каждого продукта определяется лимитирующая стадия. Продукты выпускаются партиями и длительности технологических циклов определяются длительностью лимитирующей стадии  $\tau_i$  умноженной на число партий  $i$ -го продукта ( $n_i$ ) и суммы длительности технологической стадии до лимитирующей стадии, а также суммы длительности технологических стадий после лимитирующей стадии.

Для любого  $i$ -го продукта длительность технологического цикла выпуска ( $T_{ци}$ ) определяется по формуле:

$$T_{ци} = \sum_{j=1}^{i-1} \tau_{i,j} + n_i * \tau_i + \sum_{j=i+1}^{M_i} \tau_{i,j}; \quad i=1, \dots, N \quad (25)$$

Длительность технологического цикла гибкой схемы при последовательном выпуске равна сумме длительностей технологических стадий в производстве первого продукта до лимитирующей стадии, сумме длительностей лимитирующих стадий в производстве  $i$ -ых продуктов умноженных на число партий данного продукта и сумме длительностей технологических стадий после лимитирующей стадии в производстве последнего продукта  $N$ .

Длительность технологического цикла гибкой схемы определяется по формуле:

$$T_{ци} = \sum_{j=1}^{i-1} \tau_{i,j} + \sum_{i=1}^N n_i * \tau_{i,i} + \sum_{j=1+1}^{M_N} \tau_{N,j} \quad (26)$$

### **Математическое моделирование вспомогательных операций загрузки, выгрузки и перемещения потоков массы; нагревания (охлаждения) при постоянной и переменной температурах теплоносителя**

Рассмотрим наиболее часто встречающиеся в периодических производствах вспомогательные и основные технологические операции (процессы).

Вспомогательные:

- загрузка/выгрузка;
- нагревание (охлаждение);

- перемешивание;
- растворение.

Основные:

- химическое превращение (химический синтез, очистка, выделение);
- отгонка;
- экстракция;
- кристаллизация;
- выпаривание;
- адсорбция;
- фильтрование;
- ректификация;
- центрифугирование;
- сушка.

На концептуальном уровне модель технологического процесса может быть представлена как совокупность составляющих моделей технологических операций (см. рис. 1).

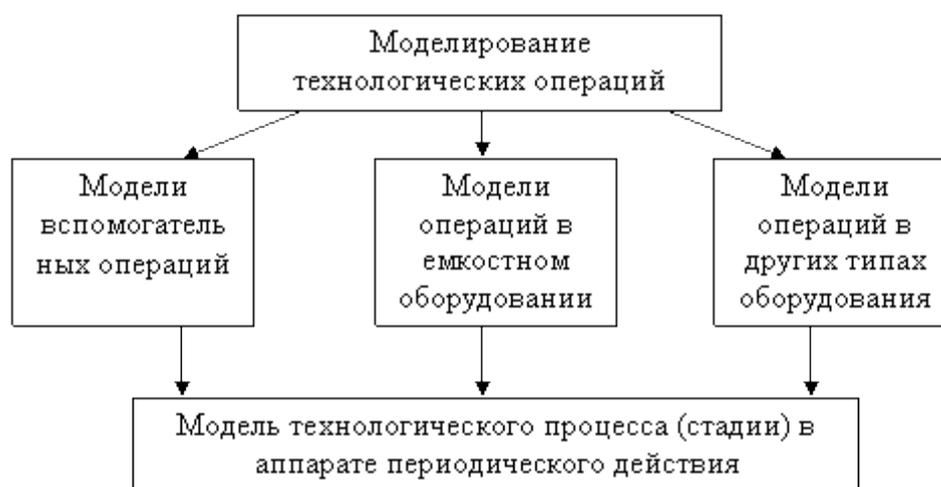


Рис. 1. Состав модели технологического процесса

### ***Модели вспомогательных операций в аппаратах периодического действия.***

В процессах химической технологии следует различать 3 основных типа загрузки-выгрузки реагентов и перемещения потоков реакционной массы со стадии на стадию:

1. Загрузка (выгрузка) твердых реагентов;
2. Загрузка (выгрузка) газообразных реагентов;
3. Загрузка-выгрузка (перемешивание) жидких реагентов.

Жидкие реагенты поступают в реакторы либо из мерников самотеком, либо подаются насосами-дозаторами. Твердые реагенты загружаются из бункеров, загрузочных воронок-дозаторов через люки в основных аппаратах. Загрузка газообразных реагентов требует специальных устройств – барботеров, позволяющих регулировать поступление газа в жидкий объем остальных реагентов.

Выгрузка жидких продуктов, суспензий, эмульсий из аппаратов емкостного типа осуществляется либо через штуцеры в днище аппарата (аппараты с нижним спуском) самотеком или насосом, либо через трубу перекачивания сжатым воздухом или азотом (аппараты с трубой перекачивания).

Продолжительность большинства вспомогательных операций зависит от объема передаваемой массы.

Математической моделью операции загрузки или выгрузки жидких реагентов или продуктов является соответствующий вариант уравнения Бернулли, в результате решения которого определяют продолжительность операции.

### I. Модели загрузки-выгрузки жидких реагентов.

□ *Загрузка-выгрузка самотеком из аппаратов или мерников с нижним спуском.*

Для определения времени загрузки/выгрузки самотеком из мерников (аппаратов) используются два графических представления (см. рис. 2 и рис. 3): истечение жидкости из цилиндрического сосуда при постоянном и переменном уровнях соответственно.

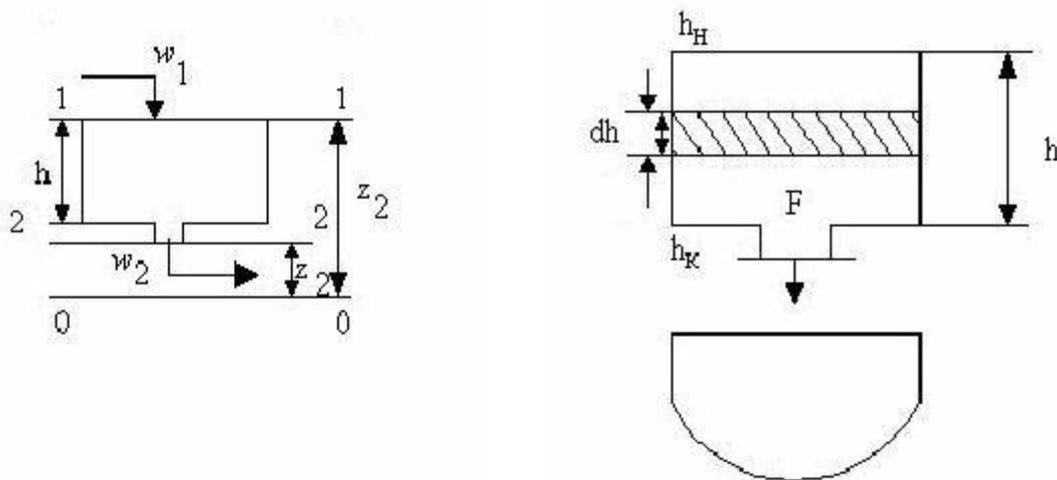


Рис. 2. Истечение жидкости из цилиндрического сосуда при постоянном уровне

Рис. 3. Истечение жидкости из цилиндрического сосуда при переменном уровне.

Рассмотрим случай истечения жидкости при постоянном уровне (рис. 2).

Выбираем два сечения:

Первое - соответствующее входу в аппарат (1).

Второе - соответствующее выходу из аппарата (2).

Выбираем плоскость сравнения (0).

Вспомогательная операция выгрузки из аппарата с нижним спуском заключается в истечении жидкости из цилиндрического сосуда от начальной высоты  $h_n$  до конечной высоты  $h_k$  (рис. 3).

Запишем уравнение Бернулли для идеальной жидкости (см. рис. 2):

$$z_1 + \frac{p_1}{\rho g} + \frac{w_1^2}{2g} = z_2 + \frac{p_2}{\rho g} + \frac{w_2^2}{2g} \quad (1)$$

где  $z_1$  и  $z_2$  - геометрические напоры на уровне 1 и 2, м,

$p_1$  - давление в аппарате на уровне 1, Па,

$p_2$  - давление в аппарате на уровне 2, Па,

$\frac{p_1}{\rho g}$  и  $\frac{p_2}{\rho g}$  - статический напор,

$\frac{w_1^2}{2g}$  и  $\frac{w_2^2}{2g}$  - скоростной напор,

$w_1$  - скорость жидкости, загружаемой в аппарат,  $\frac{м}{с}$ ,

$\rho$  - плотность жидкости,  $\frac{кг}{м^3}$ ,

$w_2$  - скорость жидкости, выгружаемой из аппарата,  $\frac{м}{с}$ ,

Полагаем, что для открытого аппарата (см. рис. 2):

$p_1 = p_2, w_1 \approx 0$ , (т.к. очень мала),

$$\Rightarrow z_1 - z_2 = \frac{w_2^2}{2g},$$

Пренебрегая малой высотой штуцера по сравнению с высотой аппарата ( $h$ ), полагаем что:

$$h \approx z_1 - z_2$$

$$\Rightarrow w_2 = \sqrt{2gh} \quad (2)$$

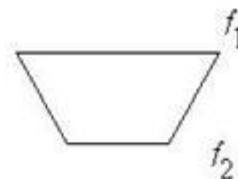
Это соотношение получено для идеальной жидкости. Для реальной жидкости вводятся поправочные коэффициенты:

$$w_2 = \varepsilon \cdot \varphi \cdot \sqrt{2gh} \quad (3)$$

где,  $\varphi$  - коэффициент скорости (поправка на то, что жидкость реальная, а не идеальная),  $\varphi < 1$

$\varepsilon$  - коэффициент сжатия струи при движении жидкости, т.к. скорость в широком сечении штуцера ( $f_1$ ) больше, чем в узком ( $f_2$ ).

$$\varepsilon = \frac{f_1}{f_2} < 1$$



где  $f_1$  и  $f_2$  - площади поперечного сечения штуцера конической формы,  $m^2$ .

Обозначим

$$\mu = \varphi \cdot \varepsilon,$$

где  $\mu$  - коэффициент расхода,

Для воды  $\mu = 0.82$ ,

для органических веществ  $\mu = 0.6 - 0.8$ ,

Для того чтобы определить объемный расход  $\left( V, \frac{m^3}{сек} \right)$  необходимо умножить скорость жидкости, выгружаемой из аппарата на площадь поперечного сечения штуцера:

$$V = f_2 \cdot \mu \cdot \sqrt{2gh} \quad (4)$$

где  $f_2$  - малое сечение штуцера,  $m^2$ .

Для штуцера цилиндрической формы с диаметром поперечного сечения ( $f$ )  $\varepsilon = 1$

$$V = f \cdot \mu \cdot \sqrt{2gh} \quad (5)$$

где  $f$  - сечение для цилиндрической формы штуцера,  $\text{м}^2$ .

Из уравнений (4) или (5) следует, что расход жидкости, вытекающей через отверстие в днище, зависит от высоты постоянного уровня жидкости над отверстием и от размера отверстия (диаметра штуцера), но не зависит от формы сосуда.

При истечении при переменном уровне жидкости (см. рис.2) уровень жидкости в разгружаемом аппарате уменьшается со временем и согласно уравнениям (4) или (5) уменьшается также скорость истечения жидкости. То есть процесс истечения носит нестационарный характер.

Определим время, за которое уровень жидкости в аппарате снизится от первоначальной высоты  $h_n$  до некоторой высоты  $h_k$  (см. рис.3).

За бесконечно малое время ( $d\tau$ ) в соответствии с уравнением (4) через цилиндрический штуцер аппарата ( $f$ ) вытечет объем жидкости:

$$dV = f \cdot \mu \cdot \sqrt{2gh} \cdot d\tau \quad (6)$$

Для аппарата периодического действия, в котором нет непрерывного притока реакционной массы, а выгрузка производится после завершения основных технологических операций за бесконечно малое изменение времени ( $d\tau$ ) изменение объема жидкости по высоте аппарата при постоянной площади поперечного сечения ( $F$ ) (см. рис. 2) составит:

$$dV = -F \cdot dh \quad (7)$$

Знак минус в формуле (7) соответствует уменьшению объема реакционной массы.

Приравняем формулы (6) и (7) согласно уравнению неразрывности потоков:

$$f_2 \cdot \mu \cdot \sqrt{2gh} \cdot d\tau = -F \cdot dh$$

Проинтегрируем это выражение в пределах от  $h_n$  до  $h_k$  (правая часть) и от 0 до  $h_n$  (левая часть):

$$\int_0^{\tau} dt = - \frac{F}{f_2 \mu \sqrt{2g} h_n} \int_{h_n}^{h_k} \frac{dh}{\sqrt{h}} \quad (8)$$

$$\tau = \frac{F}{f_2 \mu \sqrt{2g} h_n} \int_{h_k}^{h_n} h^{-1/2} dh \quad (9)$$

$$\tau = \frac{2F}{f_2 \mu \sqrt{2g}} \left( \sqrt{h_n} - \sqrt{h_k} \right) \quad (10)$$

В итоге при  $h_k = 0$ , для полной выгрузки аппарата, получаем:

$$\tau = \frac{2F \sqrt{h_n}}{f_2 \mu \sqrt{2g}}, \text{с} \quad (11)$$

Для аппаратов с коническим днищем

$$\tau = \frac{2F \sqrt{h_n}}{5 f_2 \mu \sqrt{2g}}, \text{с} \quad (12)$$

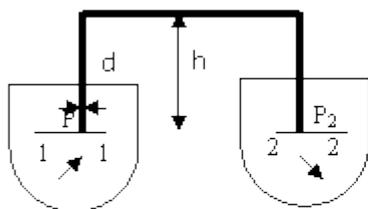
Таким образом, длительность операции загрузки (выгрузки) зависит от начальной высоты жидкости в аппарате, конструктивных характеристик аппарата (площадь поперечного сечения аппарата, площадь поперечного сечения штуцера), от свойств жидкости. Соотношения (11), (12) используются для расчета длительностей операций загрузки (выгрузки) технологических стадий по исходным данным заданных регламентом индивидуальных производств. В гибких схемах необходимо учитывать изменение длительности вспомогательных операций в зависимости от размера партии ( $q$ , кг)  $\tau = f(q)$ .

Размер партии зависит от объема реакционной массы в аппарате

$$q = f(V), \quad V = f(F, h_n)$$

□ **Загрузка-выгрузка с помощью трубы для перекачивания.**

При выводе уравнения для определения длительности загрузки (выгрузки) с помощью трубы для перекачивания допускается что, аппараты расположены приблизительно на одинаковом уровне (см. рис. 4).



$h$  – высота трубы для перекачивания, м.  
 $d$  – диаметр трубы для перекачивания, м.  
 $l$  – длина трубы для перекачивания, м

Рис. 4. Графическая иллюстрация к определению длительности загрузки-выгрузки с помощью трубы для перекачивания.

Выберем два сечения:

Первое – на входе в трубу для перекачивания в разгружаемом аппарате (1).

Второе – на выходе из трубы перекачивания в загружаемом аппарате (2).

Продолжительность выгрузки жидкости из аппарата через трубу для перекачивания сжатым воздухом или азотом определяется как вариант решения соответствующего уравнения Бернулли.

Запишем уравнение Бернулли:

$$z_1 + \frac{P_1}{\rho g} + \frac{w_1^2}{2g} = z_2 + \frac{P_2}{\rho g} + \frac{w_2^2}{2g} + h + h_n, \quad (13)$$

где

$z_1$  и  $z_2$  -геометрические напоры на уровне 1 и 2, м,

$P_1$  -давление в аппарате на уровне 1,Па,

$\frac{P_1}{\rho g}$  и  $\frac{P_2}{\rho g}$  -статические напоры,

$P_2$  - давление в аппарате на уровне 2,Па,

$\frac{w_1^2}{2g}$  и  $\frac{w_2^2}{2g}$  -скоростные напоры,

$w_1$  - скорость жидкости, загружаемой в аппарат,  $\frac{м}{с}$ ,

$\rho$  -плотность жидкости,  $\frac{кг}{м^3}$ ,

$w_2$  - скорость жидкости, выгружаемой из аппарата,  $\frac{м}{с}$ .

Уравнение (13) включает две дополнительные составляющие: высоту трубы для перекачивания ( $h$ ), создающую геометрический напор, и потернный напор ( $h_n$ ), за счет сопротивления трению, изгибам, коленам и т.п., возникающим при движении жидкости

$$h_n = \left( \xi_{тр} + \sum_{i=1}^N \xi_{i,м.с.} \right) \cdot \frac{w_2^2}{2g}, \quad \text{где} \quad (14)$$

$\xi_{тр}$  -поправочный коэффициент на трение,

$\xi_{i,м.с.}$  -поправочный коэффициент на преодоление местных сопротивлений,

$$\xi_{тр} = \lambda_{тр} \cdot \frac{l}{d}, \quad \text{где} \quad (15)$$

$\lambda_{тр}$  -коэффициент трения.

Т.к.  $z_1 \approx z_2$  и  $w_1 \approx 0$ , то

$$\frac{P_1}{\rho g} - \frac{P_2}{\rho g} = \left( 1 + \xi_{тр} + \sum_{i=1}^N \xi_{i,м.с.} \right) \cdot \frac{w_2^2}{2g} + h \quad (16)$$

$$\frac{p_1}{\rho g} - \frac{p_2}{\rho g} = \frac{\Delta p}{\rho g},$$

Обозначим,  $\frac{\Delta p}{\rho g} - h = \left( 1 + \xi_{mp} + \sum_{i=1}^N \xi_{i,mc} \right) \cdot \frac{w_2^2}{2g},$

следовательно

откуда получаем выражение для скорости жидкости, загружаемой в принимающий аппарат

$$w_2 = \frac{\sqrt{2g \left( \frac{\Delta p}{\rho g} - h \right)}}{\sqrt{\left( 1 + \xi_{mp} + \sum_{i=1}^N \xi_{i,mc} \right)}} \quad (17)$$

Домножим числитель и знаменатель подкоренного выражения на  $\rho g$ , получим выражение для скорости жидкости в выгружаемом аппарате.

$$w_2 = \frac{\sqrt{2(\Delta p - h \cdot \rho g)}}{\sqrt{\rho \cdot \left( 1 + \xi_{mp} + \sum_{i=1}^N \xi_{i,mc} \right)}}, \text{ м/с} \quad (18)$$

Для передавливания реакционной массы объемом  $V$  ( $\text{м}^3$ ) из передающего аппарата (1) в принимающий (2) через трубу для передавливания площадью поперечного сечения  $d^2$  ( $\text{м}^2$ ) со скоростью  $w_2$  ( $\text{м/с}$ ) необходимо время:

$$\tau = \frac{V}{w_2 d^2} \quad (19)$$

Таким образом, подставив значение для скорости из выражения (6) в выражение (7) получим длительность загрузки реакционной массы:

$$\tau = \frac{V}{d^2} \sqrt{\frac{\rho \left( 1 + \xi_{mp} + \sum_{i=1}^N \xi_{i,mc} \right)}{2(\Delta p - h \cdot \rho g)}}, \text{ с} \quad (20)$$

Таким образом, длительность загрузки (выгрузки) зависит от геометрических характеристик передающего (разгружаемого) аппарата и трубы для передавливания, разности давлений в аппаратах и плотности жидкости.

Соотношение (20) предназначено для расчета длительности загрузки реакционной массы из одного аппарата в другой с помощью трубы для передавливания за счет разницы давлений. При моделировании химических гибких производств это соотношение используется для оценки изменения длительности технологических операций выгрузки в зависимости от размера партии выпускаемой продукции

$$\tau = f(q) \quad q = f(V)$$

### Модели нагревания (охлаждения)

Для нагревания реакционной массы в аппаратах емкостного типа обычно используют теплоноситель, находящийся в греющей рубашке или погружном змеевике; для охлаждения применяют хладагент, также находящийся в рубашке или змеевике. В качестве теплоносителя наиболее широко применяют насыщенный греющий пар, высокотемпературные теплоносители (ВОТ), в качестве хладагентов – охлаждающую воду (оборотную ли артезианскую), охлаждающие рассолы. Продолжительность нагревания или охлаждения реакционной массы в емкостном реакторе от температуры  $t_H$  до температуры  $t_P$  определяют, исходя из теплого баланса нестационарной теплопередачи:

$$dQ = K * F * \Delta t_{cp} * d\tau \quad (21)$$

$K$  – коэффициент теплопередачи,

$F$  – поверхность теплообмена,

$\Delta t_{cp}$  – среднелогарифмическая разность температур.

Рассмотрим случай нагревания реакционной массы в аппарате, когда тепловой емкостью аппарата пренебречь нельзя, т.е. порядки тепловой емкости самого аппарата и реакционной массы в нем примерно одинаковы (см. рис. 5).

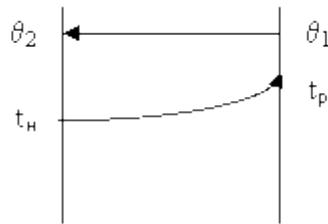


Рис. 5. Графическая иллюстрация к выводу выражения для определения длительности нагревания

$\theta_1 = \theta_2 = \text{const}$  – температура конденсирующего водяного пара,

$t_H$  – начальная температура реакционной массы в реакторе,

$t_p$  – температура реакции.

Из уравнения (21) длительность процесса нестационарной теплопередачи:

$$\int_0^i d\tau = \frac{1}{K * F * \Delta t_{\text{ср}}} * \int_{Q_1}^{Q_2} dQ \quad (22)$$

$Q_1$  – теплосодержание в системе «реактор-реакционная масса» в начале процесса нагревания,

$Q_2$  – теплосодержание в системе «реактор-реакционная масса» в конце процесса нагревания.

Проинтегрировав уравнение (22), получим:

$$\tau = \frac{1}{K * F * \Delta t_{\text{ср}}} * (Q_2 - Q_1) \quad (23)$$

$$\Delta t_{\text{ср}} = \frac{\theta_2 - t_H - \theta_1 + t_p}{\ln \left( \frac{\theta_2 - t_H}{\theta_1 - t_p} \right)} \quad (24)$$

Запишем выражение для средней разности температур (см. рис. 5).

$$\Delta t_{\text{ср}} = \frac{t_p - t_H}{\ln \left( \frac{\theta_2 - t_H}{\theta_1 - t_p} \right)} \quad (25)$$

Упростив (24) получим:

$$Q_1 = Q_{1p} + Q_{1pm} = C_p * m_p * t_H + C_{pm} * m_{pm} * t_H = (C_p * m_p + C_{pm} * m_{pm}) * t_H \quad (26)$$

где  $Q_{1p}$  – теплосодержание реактора,

$Q_{1pm}$  – теплосодержание реакционной массы,

$C_p$  – теплоемкость материала, из которого сделан реактор,

$m_p$  – масса реактора.

$$Q_2 = (C_p * m_p + C_{pm} * m_{pm}) * t_p \quad (27)$$

Подставив выражения для  $Q_1$  и  $Q_2$  из уравнений (25) и (26) в формулу (23), получим:

$$\tau = \frac{(C_p * m_p + C_{pm} * m_{pm}) * (t_p - t_H)}{K * F * \Delta t_{cp}} \quad (28)$$

Соотношение (28) применяется для определения длительности нагревания в периодическом аппарате от начальной температуры до температуры реакции в индивидуальном производстве, если аппарат находится в гибкой схеме, то оценивается изменение длительности стадии нагревания в зависимости от размера партии, равного массе реакционной массы в аппарате, кг.

$$\tau = f(q)$$

где  $q = m_{pm}$

Вывод соотношения для определения длительности процесса охлаждения аналогичен. Для этого используют графическую иллюстрацию, представленную на рис. 6.

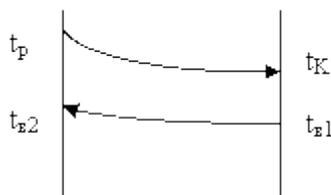


Рис. 6. Графическая иллюстрация к выводу соотношения для определения длительности охлаждения реакционной массы

Где  $t_K$  – температура, при которой происходит выгрузка реакционной массы из аппарата;

$t_p$  – температура в системе по окончании реакции,

$t_{в1}, t_{в2}$  – температура охлаждающей воды в начале и в конце процесса,

$Q_1, Q_2$  – теплосодержание в системе «реакционная масса - реактор» в начале и в конце процесса охлаждения.

$$Q_1 = C_p * m_p * t_p + C_{pж} * m_{pж} * t_p \quad (29)$$

$$Q_2 = C_p * m_p * t_K + C_{pж} * m_{pж} * t_K \quad (30)$$

Запишем основное уравнение теплопередачи:

$$-dQ = K * F * \Delta t_{cp} * dt \quad (31)$$

Знак минус в выражении (31) соответствует потере тепла в системе «реакционная масса - реактор».

Проинтегрировав уравнение (31), получим:

$$\tau = \frac{1}{K * F * \Delta t_{cp}} * (Q_2 - Q_1) \quad (32)$$

Подставим уравнения (29) и (30) в уравнение (32), получим:

$$\tau = \frac{(C_p * m_p + C_{pж} * m_{pж}) * (t_p - t_K)}{K * F * \Delta t_{cp}} \quad (33)$$

Соотношение (33) используется для определения времени вспомогательной операции охлаждения в периодических аппаратах в индивидуальных схемах; в гибких схемах – для оценки изменения длительности технологической операции охлаждения.

Рассмотрим второй случай, когда тепловой емкостью аппарата можно пренебречь, как величиной относительно малой по сравнению с тепловой емкостью реакционной массы на примере охлаждения.

Охлаждение производится в периодическом реакторе с рубашкой для случая, когда температура охлаждающей воды изменяется во времени.

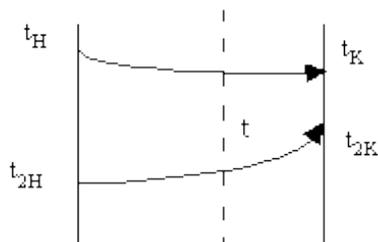


Рис. 7. Графическая иллюстрация к выводу уравнения для определения длительности охлаждения при изменении температуры охлаждающей воды

$t_{2H}$  – температура охлаждающей воды на входе в рубашку,  $t_{2H} = \text{const}$ ,

$t_{2K}$  – конечная температура охлаждающей воды на выходе из рубашки,

$t_H$  – начальная температура охлаждаемой реакционной массы в аппарате,

$t_K$  – конечная температура охлаждаемой реакционной массы.

Для произвольного момента времени  $t$  разность температур на входе в рубашку:

$$\Delta t_1 = t - t_{2H},$$

на выходе из рубашки:

$$\Delta t_2 = t - t_{2K}$$

$$\Delta t_{\varphi} = \frac{\Delta t_1 - \Delta t_2}{\ln \frac{\Delta t_1}{\Delta t_2}} \quad (34)$$

$$\Delta t_{\varphi} = \frac{t_{2K} - t_{2H}}{\ln \frac{t - t_{2H}}{t - t_{2K}}} \quad (35)$$

Основное уравнение теплопередачи для нестационарного случая:

$$dQ = K * F * \Delta t_{\varphi} * d\tau = K * F * \frac{t_{2K} - t_{2H}}{\ln \frac{t - t_{2H}}{t - t_{2K}}} * d\tau \quad (36)$$

Уравнение теплового баланса, выраженное через характеристики охлаждающей воды:

$$dQ = G_2 * C_2 * (t_{2K} - t_{2H}) * d\tau \quad (37)$$

где  $G_2$  – массовый расход охлаждающей воды.

Приравняем (36) и (37):

$$K * F * \frac{t_{2K} - t_{2H}}{\ln \frac{t - t_{2H}}{t - t_{2K}}} * d\tau = G_2 * C_2 * (t_{2K} - t_{2H}) * d\tau \quad (38)$$

$$\frac{K * F}{G_2 * C_2} = \ln \frac{t - t_{2H}}{t - t_{2K}} \quad (39)$$

$$\frac{t - t_{2H}}{t - t_{2K}} = e^{K * F / G_2 * C_2} \quad (40)$$

Обозначим:

$$e^{K * F / G_2 * C_2} = A = \text{const} \quad (41)$$

Полагаем, что все составляющие ( $K$ ,  $F$ ,  $G_2$ ,  $C_2$ ) постоянные.

Из выражения (40) с учетом выражения (41) определим выражение для переменной конечной температуры охлаждающей воды на выходе из рубашки  $t_{2K}$ :

$$t_{2K} = \frac{A * t - t + t_{2H}}{A} \quad (42)$$

Подставим выражение (42) в уравнение (37) и проведем некоторые упрощения, получим:

$$\begin{aligned} dQ &= G_2 * C_2 * \left( -t_{2H} + \frac{A * t - t + t_{2H}}{A} \right) * d\tau = G_2 * C_2 * \left( \frac{-t_{2H} * A + A * t - t + t_{2H}}{A} \right) * \\ &* d\tau = G_2 * C_2 * \left( \frac{A * (-t_{2H} + t) - (t - t_{2H})}{A} \right) d\tau = G_2 * C_2 * \frac{(A - 1)}{A} * (t - t_{2H}) * d\tau \end{aligned} \quad (43)$$

Запишем уравнение теплового баланса, выраженное через температуру охлаждаемой реакционной массы ( $dt$ ):

$$dQ = -G_1 * C_1 * dt \quad (44)$$

где  $G_1$  – масса охлаждаемой реакционной массы.

Знак «минус» в соотношении (44) соответствует потере тепла реакционной массой.

Приравняем (43) и (44):

$$-G_1 * C_1 * dt = G_2 * C_2 * \frac{(A-1)}{A} * (t - t_{2H}) * d\tau \quad (45)$$

Разделим переменные и проинтегрируем выражение (45):

$$\int_0^i d\tau = \frac{-G_1 * C_1}{G_2 * C_2} * \left( \frac{A}{A-1} \right) * \int_{t_H}^{t_K} \frac{dt}{t - t_{2H}} \quad (46)$$

$$\tau = \frac{G_1 * C_1}{G_2 * C_2} * \left( \frac{A}{A-1} \right) * \int_{t_K}^{t_H} \frac{dt}{t - t_{2H}} \quad (47)$$

$$\tau = \frac{G_1 * C_1}{G_2 * C_2} * \left( \frac{A}{A-1} \right) * \ln \left( \frac{t_H - t_{2H}}{t_K - t_{2H}} \right) \quad (48)$$

Длительность охлаждения реакционной массы в периодическом аппарате для случая, когда можно пренебречь тепловой емкостью аппарата с учетом соотношения (41):

$$\tau = \frac{G_1 * C_1}{G_2 * C_2} * \left( \frac{e^{K+F/G_2+C_2}}{e^{K+F/G_2+C_2} - 1} \right) * \ln \left( \frac{t_H - t_{2H}}{t_K - t_{2H}} \right) \quad (49)$$

Длительность нагревания реакционной массы в периодическом аппарате для случая, когда можно пренебречь тепловой емкостью аппарата, определяется аналогично охлаждению, исходя из следующих исходных данных.

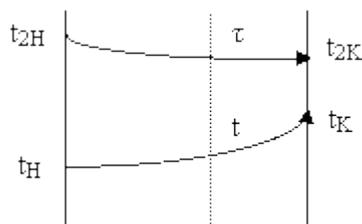


Рис. 8. Графическая иллюстрация к выводу уравнения для определения длительности нагревания при изменяющейся температуре теплоносителя

Где  $t_{2H}$  – температура нагревающего агента на входе в рубашку,  $t_{2H} = \text{const}$ ,

$t_{2K}$  – конечная температура нагревающего агента на выходе из рубашки,

$t_H$  – начальная температура реакционной массы в аппарате,

$t_K$  – конечная температура реакционной массы в аппарате.

Для произвольного момента времени  $\tau$  разность температур на входе в рубашку:

$$\Delta t_1 = t_{2H} - t,$$

на выходе из рубашки:

$$\Delta t_2 = t_{2K} - t$$

Аналогично соотношению (37)

$$dQ = G_2 * C_2 * (t_{2H} - t_{2K}) * d\tau \quad (50)$$

Уравнение теплового баланса, выраженное через характеристики нагреваемой реакционной массы:

$$dQ = G_1 * C_1 * dt \quad (51)$$

Проведя преобразования, аналогичные описанным выше (34) - (48) для охлаждения, получим, что длительность нагревания реакционной массы в периодическом реакторе через рубашку, когда температура теплоносителя изменяется в процессе нагревания, и тепловой емкостью аппарата можно пренебречь, определяется по соотношению:

$$\tau = \frac{G_1 * C_1}{G_2 * C_2} * \left( \frac{e^{K+F/G_2+C_2}}{e^{K+F/G_2+C_2} - 1} \right) * \ln \left( \frac{t_{2H} - t_K}{t_{2H} - t_H} \right) \quad (52)$$

### Моделирование перемешивания и процесса периодического массового растворения

**Перемешивание** - один из наиболее распространенных процессов химической технологии. Это способ интенсификации многих технологических процессов. Аппараты с перемешивающими устройствами используются для проведения различных технологических процессов: кристаллизации, абсорбции, экстракции, гомогенных и гетерогенных

химических реакциях и т.д. По физико-химической природе процессы перемешивания являются *диффузионными* и среди них можно выделить несколько групп явлений непосредственно связанных с условиями перемешивания:

1. перенос массы и тепла на расстояния, *соизмеримые с размером аппарата* (процессы смешения взаимно растворимых жидкостей, суспендирование, устранение градиента температур).  
Это *макромасштабные* характеристики потока;
2. дробление капель или пузырьков дисперсной фазы – *перенос массы* происходит в масштабах, *соизмеримых с размерами частиц* дисперсной фазы или даже на расстоянии межмолекулярных взаимодействий (дробление капель или пузырьков дисперсной фазы – эмульгирование).  
Это *микромасштабные* характеристики потока;
3. тепло- и массообмен *на границах раздела фаз*: интенсивность процесса зависит от физико-химического характера пограничного слоя.

Во всех случаях *продолжительность процесса перемешивания определяется достижением заданного значения той или иной физико-химической характеристики перемешиваемой массы* [2].

При перемешивании в *гомогенных средах* в аппаратах периодического действия (АПД) задача расчета *степени однородности* (гомогенизация) среды обычно сводится к определению *продолжительности перемешивания*, необходимой для достижения *заданной степени однородности* распределения растворенных веществ.

Расчет времени выравнивания концентраций (или достижение требуемой степени однородности) ведется по формуле:

$$\tau \cdot n = k_{\tau} \bar{R}^m \quad (1)$$

где  $k_{\tau}$  - коэффициент, зависящий от типа мешалки и достигаемой степени однородности среды,

$$\bar{R} = R_a / r_m$$

- отношение радиуса аппарата  $R_a$  к радиусу мешалки  $r_m$ ,

$m$  - показатель степени,  $m \approx 2$ ,  $n$  - число оборотов мешалки.

Это эмпирическое соотношение получено для мешалок различных типов.

По величине  $\bar{R} = Ra / r_m$  мешалки подразделяют на две категории:

1. *Якорные и рамные* применяют при  $\bar{R} = 1,05 \div 1,25$ , а в эмалированной аппаратуре при  $\bar{R} = 1,5 \div 2$ . Их используют для перемешивания жидкости повышенной вязкости, особенно в случае подвода или отвода тепла через рубашку. Поскольку скорость жидкости вблизи стенки аппарата увеличивается с уменьшением  $\bar{R}$ , одной из областей применения якорных и рамных мешалок является также перемешивание суспензий частиц, обладающих склонностью к налипанию на стенки.
2. *Лопастные, турбинные, пропеллерные* и другие мешалки, отличающиеся способностью создавать меридиальное (осевое) циркуляционное течение, используются при  $\bar{R} \geq 1,5$ .

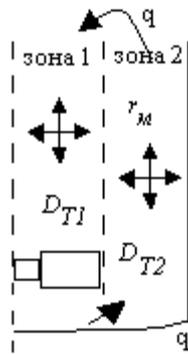
Отметим также некоторые экспериментальные и расчетные зависимости:

$$\frac{\tau \cdot \eta}{\bar{R}^2} = k_\tau = f(Re_\tau) \quad , \text{ где } \quad Re_\tau = \frac{\rho n d_m^2}{\mu}$$

При изменении  $Re_\tau$  от  $10^4$  до  $4 \cdot 10^5$  для пропеллерной мешалки  $\frac{\tau \cdot \eta}{\bar{R}^2}$  изменяется от 11 до 9; для двухлопастной мешалки  $\frac{\tau \cdot \eta}{\bar{R}^2}$  принимает значение от 19 до 15; для турбинной мешалки  $\frac{\tau \cdot \eta}{\bar{R}^2}$  изменяется от 6 до 4.

*Универсальный метод* определения времени перемешивания основан на составлении и решении уравнений макромасштабного переноса, представляющих собой уравнения однопараметрической диффузионной модели:

Согласно упрощенной циркуляционно-диффузионной модели аппарат с мешалкой без отражательных перегородок следует рассматривать как состоящий из двух концентрических зон – центральной и периферийной, разделенных поверхностью радиусом  $r_m$  (рис.1)



Зона 1 – центральная  $0 \leq r \leq r_M$

Зона 2 – периферийная  $r_M \leq r \leq R$

Рис. 1. Графическое представление однопараметрической циркуляционно-диффузионной модели перемешивания.

Перемешивание в каждой из зон осуществляется за счет турбулентной диффузии ( $D_{T1}, D_{T2}$ ), а обмен между зонами обеспечивается циркуляцией;  $q$  – циркуляционный расход жидкости между зонами  $\text{м}^3/\text{с}$ . Диффузия через границу при наличии циркуляции не учитывается.

При этом за счет высокой окружной скорости жидкости распределение концентраций в аппарате осесимметрично. Наличие турбулентной диффузии и малая ширина каждой из зон по сравнению с их высотой приводят к практически полному выравниванию концентраций по радиусу зон. В связи с этим при отношениях высоты заполнения аппарата к его диаметру  $H/D > 0,5$  достаточно учитывать только изменение концентрации в каждой из зон. Уравнения однопараметрической диффузионной модели (при мгновенном вводе трассера):

$$F_1 \frac{\partial c_1}{\partial \tau} = -q \frac{\partial c_1}{\partial h} + D_{T1} F_1 \frac{\partial^2 c_1}{\partial h^2} \quad (2a)$$

$$F_2 \frac{\partial c_2}{\partial \tau} = -q \frac{\partial c_2}{\partial h} + D_{T2} F_2 \frac{\partial^2 c_2}{\partial h^2} \quad (2б)$$

с граничными и начальными условиями

$$q(c_2 - c_1) + D_{T1} F_1 \frac{\partial^2 c_1}{\partial h^2} = 0; \quad \frac{\partial c_2}{\partial h} = 0 \text{ при } h = H, \tau > 0 \quad (3a)$$

$$q(c_2 - c_1) + D_{T2} F_2 \frac{\partial^2 c_2}{\partial h^2} = 0; \quad \frac{\partial c_1}{\partial h} = 0 \text{ при } h = 0, \tau > 0 \quad (36)$$

$$c_{1,2} = \delta(H - h)^* \text{ при } \tau = 0 \quad (3B)$$

Здесь  $c_1$  и  $c_2$  - безразмерные концентрации трассера в зонах 1 и 2 в момент времени  $\tau$ :

$$c_{1,2} = \frac{c_{1,2}(\tau, h) - c_H}{c_K - c_H} \quad (3^*)$$

где  $c_K, c_H$  - средние концентрации трассера в моменты времени  $\tau = \infty$  и  $\tau = 0$  (то есть до ввода трассера и после его распределения);  $c_{1,2}(\tau, h)$  - концентрация трассера в момент  $\tau$ ;  $q$  - циркуляционный расход жидкости между зонами  $\text{м}^3/\text{с}$ ;  $F_1 = \pi r_M^2$ ,  $F_2 = \pi(R^2 - r_M^2)$  - площади поперечного сечения центральной и периферийной зон,  $\text{м}^2$ ;  $H$  - высота заполнения аппарата,  $\text{м}$ ;  $h$  - вертикальная координата,  $\text{м}$ ;  $D_{T1}, D_{T2}$  - осредненные по сечению значения коэффициентов турбулентной диффузии в осевом направлении в каждой из зон  $\text{м}^2/\text{с}$ .

Значения  $D_{T1}$  и  $D_{T2}$  определяют по формулам:

$$D_{T1} = \frac{2}{r_M^2} \int_0^{r_M} D_{T1}^A r dr \quad (4a)$$

$$D_{T2} = \frac{2}{R^2 - r_M^2} \int_{r_M}^R D_{T2}^A r dr \quad (46)$$

где  $D_{T1}^A, D_{T2}^A$  - локальные коэффициенты турбулентного переноса.

$$D_{T1}^A = \alpha_1^2 \omega_0 r_0^2 \bar{r}_M^2 (4\psi_1 \bar{r}^3 + 3\psi_2 \bar{r}^2 + 1) \text{ при } 0 \leq \bar{r} \leq \bar{r}_M \quad (5a)$$

$$D_{T2}^A = -\alpha_2^2 \omega_0 r_0^2 (\bar{R} - \bar{r}_M)^2 (4\psi_1 \bar{r}^3 + 3\psi_2 \bar{r}^2 + 1) \text{ при } \bar{r}_M \leq \bar{r} \leq 1 \quad (56)$$

$$D_{T2}^A = \alpha_2^2 \omega_0 r_0^2 (\bar{R} - \bar{r}_M)^2 \frac{1 + \psi_1 + \psi_2}{\bar{r}_2} \text{ при } 1 \leq \bar{r} \leq \bar{R} \quad (5B)$$

где  $\bar{r} = \frac{r}{r_0}$ ,  $r_0$  - радиус мешалки,  $\text{м}$ ,

$\omega_0$  - угловая скорость мешалки,

$r$  - текущий радиус жидкости.

$\psi_1, \psi_2$  - гидродинамические параметры;

$-1 \leq \psi_1 \leq 1$  для  $\bar{R} = 1,5 \div 2$

$\psi_2 = -0,5 - 1,25\psi_1$

$$\bar{r}_M = \frac{r_M}{r_0}$$

- радиус центральной зоны, определяется либо по соотношению:

$$\left( 4\psi_1 \bar{r}_M^3 + 3\psi_2 \bar{r}_M^2 + 1 \right) = 0 \quad (6)$$

либо графически (см. рис. 2).

$\alpha_{1,2}$  - коэффициент пропорциональности в выражениях длины пути перемешивания.

$$l_1 = \alpha_1 r_M, \quad 0 \leq r \leq r_M \quad (7a)$$

$$l_2 = \alpha_2 (R - r_M), \quad r_M \leq r \leq R \quad (7b)$$

находят экспериментально

$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_0 = 0,22$  - для скребковой мешалки для переноса в осевом направлении.

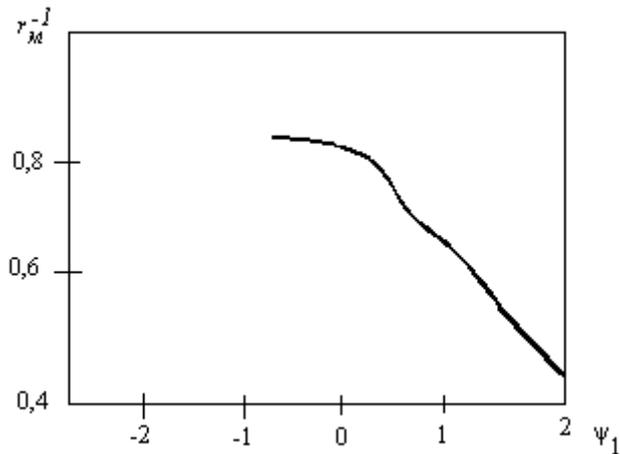


Рис. 2. Зависимость радиуса центральной зоны от гидродинамического параметра  $\psi_1$ .

Для численного решения уравнения (2а,б) и (3а-в) целесообразно преобразовать в конечно-разностную форму, представив каждую из зон аппарата (рис.3.) как совокупность элементарных объемов, расположенных последовательно по высоте ( $H/z$  - шаг конечно-разностной схемы,  $z$  - число элементарных объемов).

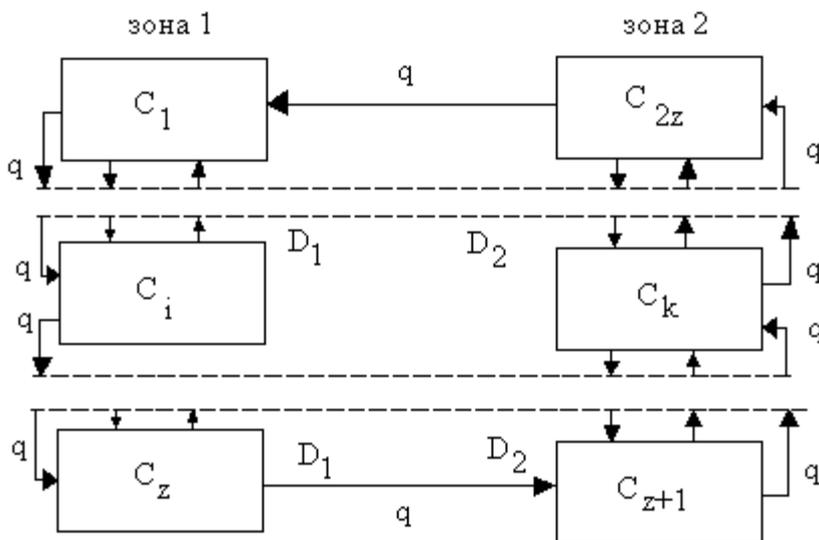


Рис.3. Графическое представление численного решения циркуляционно-диффузионной модели перемешивания в конечно-разностной форме.

Для аппаратов с объемом  $V$  до  $2,5 \text{ м}^3$  с мешалками различных типов  $\alpha_0 = 0,45 \pm 0,05$ .

Выбор граничных условий (За-в) зависит от места и способа ввода смешиваемых веществ.

При импульсном вводе трассера в верхнюю часть центральной зоны аппарата граничные условия соответствуют записанным соотношениям (За-в).

При достаточно большом  $z$ , то есть при малых отношениях  $H/z$ , концентрацию в каждом из элементарных объемов можно принять постоянной и зависящей только от времени, а градиент концентраций на границе между соседними элементарными объемами выразить в линейном приближении как отношение разности концентраций в них к величине высоты ячейки  $H/z$ :

$$\left(\frac{dC}{dh}\right)_{i,i+1} = \frac{C_{i+1} - C_i}{H/z} \quad (8)$$

где  $C_i, C_{i+1}$  - концентрация в элементарных объемах  $i, i+1$ .

Таким образом, уравнения в частных производных (2а, б) могут быть заменены системой, включающей  $2 \square z$  обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{HF_1}{z} \frac{dC_1}{d\tau} &= q(C_{2z} - C_1) + D_1 F_1 (C_2 - C_1) \left(\frac{z}{H}\right) \\ \dots \dots \dots \\ \frac{HF_1}{z} \frac{dC_i}{d\tau} &= q(C_{i-1} - C_i) + D_1 F_1 (C_{i-1} - 2C_i + C_{i+1}) \left(\frac{z}{H}\right) \\ \dots \dots \dots \\ \frac{HF_1}{z} \frac{dC_z}{d\tau} &= q(C_{z-1} - C_z) + D_1 F_1 (C_{z-1} - C_z) \left(\frac{z}{H}\right) \\ \dots \dots \dots \\ \frac{HF_2}{z} \frac{dC_{z+1}}{d\tau} &= q(C_z - C_{z+1}) + D_2 F_2 (C_{z+2} - C_{z+1}) \left(\frac{z}{H}\right) \\ \dots \dots \dots \end{aligned} \quad (9)$$

$$\frac{HF_2}{z} \frac{dC_k}{d\tau} = q(C_{k-1} - C_k) + D_2 F_2 (C_{k-1} - 2C_k + C_{k+1}) \left(\frac{z}{H}\right)$$

.....

$$\frac{HF_2}{z} \frac{dC_{2z}}{d\tau} = q(C_{2z-1} - C_{2z}) + D_2 F_2 (C_{2z-1} - C_{2z}) \left(\frac{z}{H}\right)$$

Здесь  $F_1, F_2$  - площади поперечного сечения зон,  $m^2$ .

При размещении точки ввода трассера в верхней части периферийной зоны начальные условия, соответствующие импульсной подаче трассера, имеют вид:

$$C_1 = \dots = C_i = \dots = C_k = \dots = C_{2z-1} = 0,$$

$$C_{2z} = \frac{\bar{R}^2 z}{\left(\bar{R}^2 - \bar{r}_M^2\right)}, \text{ при } \tau = 0 \quad (10a)$$

В случае ввода трассера в верхнюю часть центральной зоны:

$$C_1 = \left(\frac{\bar{R}^2}{\bar{r}_M^2}\right) z; \quad (10b)$$

$$C_2 = \dots = C_i = \dots = C_k = \dots = C_{2z} = 0, \text{ при } \tau = 0$$

Основные четыре параметра, отражающие гидродинамическую обстановку в аппарате – радиус границы зон  $r_m$  (формула 6), осредненные значения коэффициентов диффузии  $D_1, D_2$  (формулы 4,5), а также циркуляционный расход  $q$ , который можно определить по формуле:

$$q = k_q n d_m^3 \quad (11)$$

где коэффициент  $k_q$  при турбулентном режиме равен 0,033 – для рамных и якорных мешалок, 0,014 – для фрезерных мешалок.

Коэффициент  $k_q$  можно также определить по эмпирическим зависимостям:

$$k_{\varphi} = \varphi_{\varphi} \exp[6,9\bar{G}(r_0)] \quad (12)$$

$$\text{где } \bar{G}(r_0) = \psi_1 + \psi_2 + 1 \quad (13)$$

$\varphi_{\varphi} = 0,0013$  – для открытых турбинных мешалок и лопастных с вертикальными лопастями;

$\varphi_{\varphi} = 0,0028$  – для мешалок с наклонными лопастями, пропеллерных и закрытых турбинных.

Наилучшая точность расчетов системы (9) достигается при  $z \geq 5$ .

Степень однородности среды оценивают по формуле:

$$\Delta C_{\max} = \left| \frac{C_{\max} - C_{\min}}{C_{\bar{x}} - C_{\bar{x}}} \right| \quad (14)$$

где  $C_{\min} = C_{2z}$

На практике  $\Delta C_{\max} = 0,05$ . При увеличении  $C_{\max}$  время перемешивания резко возрастает, а время достижения такой степени однородности в промышленных аппаратах средних объемов обычно составляет 3-10 мин.

Рассмотренные уравнения применимы, если распределение концентраций смешиваемых веществ по радиусу каждой из зон аппарата близко к равномерному. При малой высоте аппарата по сравнению с его диаметром ( $H/d < 0,5$ ) и больших отношениях радиуса аппарата и к радиусу мешалки ( $\bar{R} > 6$ ) разница локальных значений концентраций в радиальном направлении может быть существенной.

В этом случае процесс выравнивания концентраций описывается уравнением:

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} = 2\pi H \left[ D_{\text{тр}}^A(r) r \frac{\partial c}{\partial r} \right] \quad (15)$$

где  $D_{\text{тр}}^A$  - локальное значение коэффициента турбулентной диффузии в радиальном направлении, рассчитывается по уравнениям (5а-в).

Решение уравнения (15) конечно-разностным методом при представлении объема аппарата в виде совокупности  $z$  концентрических элементарных объемов равной ширины, каждый из которых рассматривается как ячейка идеального смешения с концентрацией  $C_i$ , а обмен между ячейками осуществляется в результате турбулентной диффузии, может быть получено из следующих представлений градиента концентрации на границе соседних объемов  $i$  и  $i+1$ :

$$\frac{dC}{dr} = \frac{C_{i+1} - C_i}{r_{i+1} - r_i} = \frac{C_{i+1} - C_i}{R/z} \quad (16)$$

Записав систему обыкновенных дифференциальных уравнений в виде:

$$\begin{aligned} \frac{dC_1}{d\bar{r}} &= C_2 - C_1, \\ \frac{dC_i}{d\bar{r}} &= \frac{C_{i+1} - C_i}{i} - \frac{C_i - C_{i-1}}{i-1}, \end{aligned} \quad (17)$$

.....

$$\frac{dC_z}{d\bar{r}} = \frac{C_{z-1} - C_z}{(z-1)(2z-1)}$$

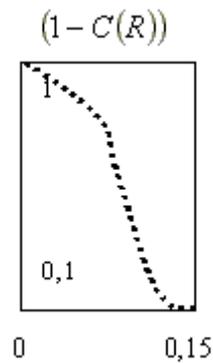
где  $\bar{r} = 2\tau\alpha_p^2\omega_0(\psi_1 + \psi_2 + 1)z^4 / \bar{R}^2$  - безразмерная величина (18)

Получают, что распределение концентраций оказывается функцией только одной переменной  $\bar{r}$ .

Решение системы уравнений (17) дает обобщенные результаты для разных значений  $\bar{\theta}$ ,

$$\text{где } \theta = \frac{\bar{r}}{z^4} = 2\tau\alpha_p^2\omega_0(\psi_1 + \psi_2 + 1) / \bar{R}^2 \quad (19)$$

$$0 \leq \theta \leq 0,15 \text{ при изменении } 1 \leq 1 - C(R) \leq 0,1$$



Кривая  $C(R) = f(\theta)$  для ввода трассера в центральную часть аппарата соответствует граничным условиям:

$$C_1 = z^2; \quad C_2 = \dots = C_i = \dots = C_k = \dots = C_{2z} = 0 \quad \text{при } \bar{r} = 0 \quad (20)$$

Использование этой кривой позволяет проводить оценку времени достижения заданной степени однородности концентраций в радиальном направлении:

$$\tau = \frac{\bar{R}^2}{2\alpha_f^2 \omega_0 (\psi_1 + \psi_2 + 1)} \quad (21)$$

### Растворение.

#### 1. Растворение полностью растворимых веществ [7с].

Процесс с участием полностью растворимых веществ называется собственно растворением. Растворение твердых веществ в жидких растворителях происходит в тех случаях, когда концентрация растворяемого вещества в жидкой фазе меньше концентрации насыщения ( $C_f < C^*$ ).

Скорость растворения чистого вещества (см. рис. 4) зависит от суммарного сопротивления всех последовательных стадий процесса: диффузионного подвода вещества растворителя к поверхности взаимодействия, перехода вещества из твердофазного в растворенное состояние и диффузионного отвода растворенного компонента от поверхности в основную массу растворителя (раствора).

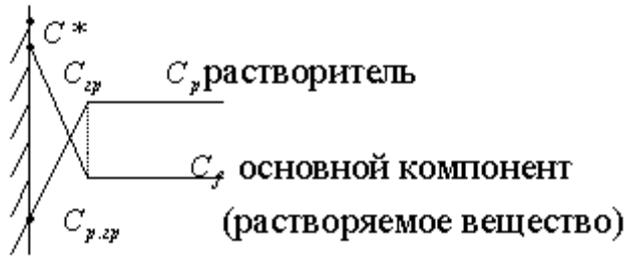


Рис. 4. Графическая иллюстрация процесса растворения.

1. Если лимитирующей стадией является стадия диффузионного отвода растворяемого вещества от поверхности растворения, величина скорости растворения определяется интенсивностью внешней массоотдачи:

$$-\frac{dM}{d\tau} = \beta S (C^* - C_f) \quad (22)$$

где  $M$  - масса растворяемого вещества твердой фазы (г),

$\beta$  - коэффициент массоотдачи (м/с),

$S$  - поверхность растворяемой твердой фазы (м<sup>2</sup>),

$C_f$  - концентрация растворяемого вещества в основной массе раствора (мг/м<sup>3</sup>).

2. Если лимитирующей стадией является сопротивление собственно процесса растворения, интенсивность процесса растворения может быть записана как скорость химической реакции по величине концентрации растворителя  $C_{р.р}$  в основной массе раствора:

$$-\frac{dM}{d\tau} = k S C_{р.р}^m \quad (23)$$

где  $m$  и  $k$  - порядок и константа скорости реакции растворения.

3. Если лимитирующей стадией является подвод растворителя к поверхности взаимодействия, то концентрация растворителя на поверхности равна 0, движущая разность концентраций равна  $C_p$

, а скорость растворения записывается в виде уравнения массоотдачи:

$$-\frac{dM}{d\tau} = a\beta_p S(C_p - C_{p,zp}), C_{p,zp} = 0 \quad (24)$$

где  $\beta_p$  - коэффициент массоотдачи для растворителя (м/с),

$a$  - стехиометрический коэффициент для реакции растворения.

Изменение концентрации растворяемого компонента в случае одинакового порядка диффузии и кинетического сопротивления представлено на рис. 4., где концентрация целевого компонента на поверхности растворения меньше концентрации насыщения ( $C_{zp} < C^*$ ), а концентрация растворителя на поверхности меньше концентрации растворителя в основном потоке ( $C_{p,zp} < C_p$ ).

Концентрации  $C_{zp}$  и  $C_{p,zp}$  определяются из условий равенства общей скорости растворения всем частным скоростям процессов (22, 23, 24):

$$-\frac{dM}{d\tau} = kSC_{p,zp}^m = a\beta_p S(C_p - C_{p,zp}) = \beta S(C_{zp} - C_f) \quad (25)$$

### 1. Растворение частицы.

Если кинетика растворения зависит только от скорости химического взаимодействия растворителя и растворяемого вещества при постоянных значениях концентрации растворителя и температуры уравнение (23) можно записать относительно радиуса сферической частицы ( $r$ ):

$$dM = \rho_T dV \quad (26)$$

$$dV = Sdr \quad (27)$$

$$-\frac{\rho_T dV}{d\tau} = k_s C_p^m \quad (28)$$

$$-\frac{\rho_T S dr}{d\tau} = k_s C_p^m \quad (29)$$

$$-\frac{dr}{d\tau} = \frac{k_s}{\rho_T} C_p^m \quad (30)$$

$$-\int_{r_0}^r dr = \frac{k}{\rho_T} C_p^m \int_0^\tau d\tau \quad (31)$$

$$-r + r_0 = \frac{k}{\rho_T} C_p^m \tau \quad (32)$$

или

$$r = r_0 - \frac{k}{\rho_T} C_p^m \tau \quad (33)$$

Полное растворение частицы происходит за время  $\tau_m$  при  $r = 0$ , тогда из (33) получим:

$$\tau_m = \frac{r_0 \rho_T}{k C_p^m} \quad (34)$$

Степень растворения ( $\gamma$ ) (для не растворившегося вещества) для сферической частицы определяется как:

$$\gamma = \left( \frac{r}{r_0} \right)^3 \quad (35)$$

$$\gamma = \left( 1 - \frac{k C_p^m}{r_0 \rho_T} \tau \right)^3 \quad (36)$$

В промышленных процессах растворения в большинстве случаев лимитирующей стадией является отвод вещества, тогда уравнение (22) для сферической частицы запишется в виде:

$$\frac{dr}{\beta(r)} = \frac{\Delta C}{\rho_T} d\tau \quad (37)$$

где  $\Delta C = C^* - C$ , где  $C = C_f$

Интегрируя уравнение (37), получим:

$$-\int_{r_0}^r \frac{dr}{\beta(r)} = \frac{\Delta C}{\rho_T} \tau \quad (38)$$

Интегрирование зависит от вида зависимости  $\beta(r)$ .

В простом случае, когда радиус  $r_0$  частицы и скорость ее обтекания раствором  $\omega$  малы и критерий Рейнольдса:

$Re = \frac{2ax_0}{\nu} < 0,2$ , а, следовательно, критерий Нуссельта:  $Nu = 2$ , тогда

$$\beta = D/r \quad (39)$$

$D$  - коэффициент молекулярной диффузии целевого компонента мг/с.

Для сферической частицы, не меняющей формы в процессе растворения:

$M = \rho_T \cdot 4\pi r^3 / 3$  и  $S = 4\pi r^2$ , тогда подставляя  $\beta, M, S$  в уравнение (22) и интегрируя, получим:

$$r = \left( r_0^2 - 2D\Delta C\tau / \rho_T \right)^{1/2} \quad (40)$$

Полное растворение частицы ( $r = 0$ ) происходит за время:

$$\tau_{m2} = \frac{r_0^2 \rho_T}{2D\Delta C} \quad (41)$$

и решение  $\tau_m$  40) можно записать через время полного растворения :

$$r = \sqrt{r_0^2 \left( 1 - 2 \frac{D \Delta C \tau}{r_0^2 \rho_T} \right)} = r_0 \sqrt{\left( 1 - \frac{\tau}{\tau_m} \right)} \quad (42)$$

$$\frac{r}{r_0} = \left( 1 - \frac{\tau}{\tau_m} \right)^{1/2} \quad (43)$$

а степень растворения в этом случае:

$$\gamma = \frac{M}{M_0} = \left( 1 - \frac{\tau}{\tau_m} \right)^{3/2} = \left( \frac{r}{r_0} \right)^3 \quad (44)$$

Для  $Re > 0,2$ ,  $Nu = 2 + 0,6 Re^{0,5}$  получают более сложную зависимость для времени растворения:

$$\tau = \frac{2 \rho_T}{DK^4 \Delta C} \left[ \frac{(1+Kz)^3}{3} - \frac{3}{2}(1+Kz)^2 + 3(1+Kz) - \ln(1+Kz) \right] \frac{\sqrt{r_0}}{\sqrt{r}} \quad (45)$$

где  $K = 0,3 \sqrt{2\omega/\nu} = const$ ,  $z$  - переменная интегрирования.

Для  $Re > 500$  при  $\beta = \frac{K_1}{\sqrt{r}}$ , где  $K_1 = 0,4 D \cdot Pr^{1/3} \sqrt{2\omega/\nu}$  кинетика растворения частицы описывается уравнением:

$$\tau = \frac{2}{3} \frac{\rho_T}{K_1 \Delta C} \left( r_0^{3/2} - r^{3/2} \right) \quad (46)$$

В широком диапазоне значений критерия  $Re$  диффузионный процесс растворения частицы лучше описывается следующим корреляционным соотношением:

$$Nu = 2 + 0,347 (Re \sqrt{Pr})^{0,62} + 0,569 (Pr \cdot Ar)^{0,25} \quad (47)$$

$$Ar = \frac{gd^3}{\nu^2} \frac{\rho_s - \rho}{\rho}$$

где  $\frac{gd^3}{\nu^2} \frac{\rho_s - \rho}{\rho}$  - учитывает естественную конвекцию около растворяющейся поверхности, возникающую за счет разности плотностей насыщенного раствора у поверхности и ненасыщенного раствора в основном объеме раствора.

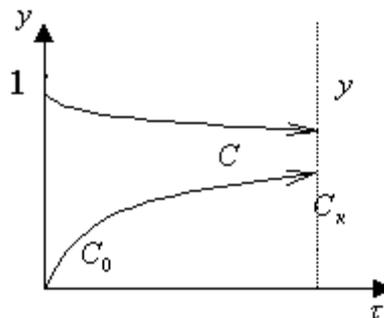
## 2. Массовое растворение (периодический процесс).

Растворение частиц в периодическом процессе при полном перемешивании суспензии происходит в условиях *увеличивающейся концентрации целевого компонента в растворе*.

Количество растворяющегося вещества в дисперсной твердой и сплошной фазах определяется уравнением материального баланса. В периодическом процессе с перемешиванием обеих фаз концентрация в растворе и радиус растворяющихся сферических частиц равномерны по рабочему объему аппарата:

$$\frac{4\pi}{3}(r_0^3 - r^3)\rho_T N = V(C - C_0) \quad (48)$$

где  $\frac{4\pi}{3}(r_0^3 - r^3)\rho_T N$  - дисперсная среда;  $V(C - C_0)$  - сплошная среда (растворитель), где  $N$  - число частиц начального радиуса  $r_0$ ,  $V$  - объем чистого растворителя.



Уравнение (48) можно записать через текущее значение

$$y = \frac{r}{r_0} :$$

относительного радиуса частиц

$$\alpha(1 - y^3) = C - C_0 \quad (49)$$

где  $\alpha = \frac{M_0}{V}$ ,  $M_0 = \frac{4\pi}{3} r_0^3 \rho_T N$  - масса твердой фазы в начале процесса растворения.

*Балансовое уравнение (49), определяющее связь между степенью растворения твердой фазы и концентрацией целевого компонента в растворителе, должно анализироваться совместно с кинетическими соотношениями при расчетах массового растворения.*

*Модель растворения монодисперсного сферического материала в периодическом режиме записывается:*

$$\alpha(1 - y^3) = C - C_0, \quad y = 1 \text{ при } \tau = 0 \quad (50a)$$

$$-\frac{dy}{d\tau} = \frac{\beta(y)}{\rho_T r_0} (C^* - C) \quad (50b)$$

Подстановка  $C$  из уравнения (50a) в уравнение (50b), разделение переменных и интегрирование при  $r = r_0$  при  $\tau = 0$  дают:

$$\int_y^1 \frac{dy}{\beta(y)[\Delta C - \alpha(1 - y^3)]} = \frac{\tau}{\rho_T r_0} \quad (51)$$

где  $\Delta C = C^* - C_0$ .

Для сложных зависимостей  $\beta(y)$  значение интеграла (51) может быть найдено приближенными методами:

Для  $Nu = 2$ ,  $\beta(y) = \frac{D}{r_0 y}$  - интеграл (51) принимает вид:

$$\int_y^1 \frac{y dy}{\frac{\Delta C}{\alpha} - 1 + y^3} = \frac{D \alpha}{\rho_T r_0^2} \tau \quad (52)$$

Здесь возможны два случая:

Первый случай  $\frac{\Delta C}{\alpha} = \frac{V(C^* - C_0)}{M_0} < 1$ , когда *исходной массы*  $M_0$  растворившегося вещества *достаточно* для достижения равновесной концентрации  $C^*$ , и вычисление интеграла приводит к выражению:

$$f(y) - f(1) = \frac{D\alpha}{\rho_T r_0^2} \tau \quad (53)$$

где  $f(y) = \frac{1}{6a_1} \ln \frac{a_1^2 + a_1 y + y^2}{(a_1 - y)^2} - \frac{1}{a_1 \sqrt{3}} \operatorname{arctg} \frac{2y + a_1}{a_1 \sqrt{3}}$ ,  $a_1 = \sqrt[3]{1 - \Delta C / \alpha}$ .

Наименьший возможный размер, к которому стремятся частицы при  $C \rightarrow C^*$  определяется из уравнения (49):

$y_{\min} = \sqrt[3]{1 - \Delta C / \alpha}$ . При этом *время* достижения равновесной концентрации и *относительного размера*  $y_{\min}$  *бесконечно велико*.

$$\frac{\Delta C}{\alpha} = \frac{V(C^* - C_0)}{M_0} > 1$$

Второй случай, когда *начального количества* растворяемого вещества *недостаточно*, чтобы насытить объем  $V$  растворителя.

Интегрирование (52) дает следующее выражение:

$$f_1(y) - f_1(1) = \frac{D\alpha}{\rho_T r_0^2} \tau \quad (54)$$

где  $f_1(y) = \frac{1}{6a_1} \ln \frac{a_1^2 - a_1 y + y^2}{(a_1 + y)^2} + \frac{1}{a_1 \sqrt{3}} \operatorname{arctg} \frac{2y - a_1}{a_1 \sqrt{3}}$ ,  $a_1 = \sqrt[3]{\Delta C / \alpha - 1}$

Максимальная концентрация компонента находится из баланса (49) *при полном растворении твердой фазы* ( $y = 0$ ):  $C_{\text{нр}} = C_0 + M_0 / V$ .

Тогда величина времени достижения концентрации  $C_{\text{нр}}$  определяется из (54) при  $y = 0$ :

$$\tau_{\text{ж}} = \frac{\rho_T r_0^2}{D\alpha} [f_1(1) - f_1(0)] \quad (55)$$

### 1. Экспериментальная кинетика растворения.

Существуют некоторые факторы, затрудняющие исчерпывающее теоретическое описание процессов растворения реальных веществ. Так, отдельные частицы, имеющие одинаковый начальный размер, могут в реальных условиях растворяться с неодинаковыми скоростями. Неодинаковыми могут быть также скорости растворения на отдельных участках поверхности частицы. Форма частиц может быть далека от сферической и т.д.

В этих случаях кинетику растворения определяют экспериментально. А исследуемый полидисперсный материал должен быть представлен по всем основным параметрам.

Тогда относительная доля *нерастворившегося* вещества  $\gamma$  является функцией времени растворения  $\tau$  при некоторых значениях концентрации  $C$  в растворе, температуре процесса  $t$  и гидродинамической обстановки в аппарате  $\Gamma$ :

$$\gamma = \gamma(\tau, C, t, \Gamma) \quad (56)$$

Подставляя безразмерное время  $\theta = \frac{\tau}{\tau_{\text{ж}}}$ , где  $\tau_{\text{ж}}$  - время полного растворения, определяется экспериментально, используем зависимость  $\gamma(\theta)$ , называемую *кинетической функцией* процесса растворения (см. рис. 5).

Преимущество зависимости  $\gamma(\theta)$  в том, что она инвариантна относительно  $C, t, \Gamma$ , то есть каждому значению  $\theta$  соответствует одно значение  $\gamma$  при любых постоянных значениях  $C, t, \Gamma$ . Физически это означает, что влияние концентрации, температуры и гидродинамической обстановки в аппарате сосредоточено в величине времени полного растворения  $\tau_{\text{ж}}(C, t, \Gamma)$ , значения которого зависят от данных параметров.

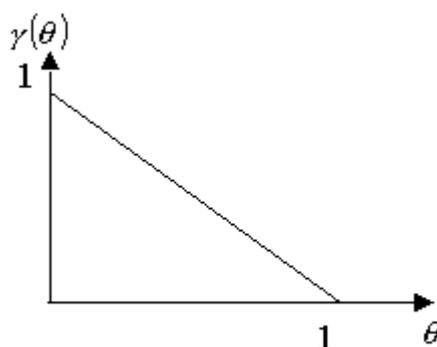


Рис.5. Графическая зависимость  $\gamma(\theta)$ .

В некоторых случаях  $\gamma(\theta)$  может быть получено из модельных представлений. Например, по соотношению:

$$\gamma = (1 - \theta)^3 \quad (57)$$

где  $\theta = \frac{\tau}{\tau_{\infty}}$ , а  $\tau_{\infty}$  определяется по формуле (34).

Практическая же ценность метода кинетической функции состоит в использовании ее для реальных процессов растворения, когда упрощенные модели являются неудовлетворительными.

В общем случае скорость растворения может зависеть от концентрации в растворителе, величины  $\gamma$ - к данному моменту растворения температуры ( $t$ ) и гидродинамических параметров ( $\Gamma$ ). Тогда

$$-\frac{d\gamma}{d\tau} = F(C, \gamma, t, \Gamma) \quad (58)$$

Представив влияние факторов в виде сомножителей, получим:

$$-\frac{d\gamma}{d\tau} = F_1(\gamma)F_2(C, t, \Gamma) \quad (59)$$

Тогда

$$\tau = \int_{\gamma}^1 \frac{d\gamma}{F_1(\gamma)} \Big/ F_2(C, t, \Gamma) \quad (60)$$

Время полного растворения материала определяется из соотношения (60) при условии  $\gamma = 0$ .

Безразмерное текущее время растворения:

$$\theta = \int_{\gamma}^1 \frac{d\gamma}{F_1(\gamma)} \Big/ \int_0^1 \frac{d\gamma}{F_1(\gamma)} \quad (61)$$

где  $\gamma(\theta)$  инвариантна относительно  $C, t, \Gamma$ . А характер зависимости скорости растворения от концентрации и температуры в процессе растворения не изменяется.

Опыты по определению  $\gamma(\theta)$  для конкретного продукта следует проводить при  $C = const$ ,  $t = const$ ,  $\Gamma = const$ .

**Моделирование основных операций.  
 Модели периодических реакторов.  
 Моделирование тепловых процессов.  
 Моделирование процесса отгонки.**

При периодическом проведении процесса исходные компоненты одновременно загружаются в аппарат, находятся в нем заданное время, пока не будет достигнута необходимая конечная концентрация смеси. При этом реагенты перемешиваются, нагреваются, охлаждаются, после чего продукты выгружаются и аппарат подготавливается к следующей операции. В каждый момент времени концентрации компонентов одинаковы во всем объеме, но непрерывно меняются со временем до достижения заданной концентрации или заданной степени превращения. Таким образом, в аппаратах периодического действия в каждый момент времени концентрация реакционной массы отличается от предыдущей, и в этом смысле для данного реактора пригодна модель идеального вытеснения вещества во времени. В этом случае идеализация реактора заключается в том, что допускается полная однородность концентраций в любом сечении его объема.

Если реакция идет без изменения объема реакционной массы  $Vr$  или его изменением можно пренебречь, то продолжительность основной

технологической операции в аппарате периодического действия (АПД) можно определить из законов формальной химической кинетики.

Моделью химической реакции в АПД является уравнение формальной кинетики, выражающее закон действующих масс [2]. Зная значения

кинетических констант и порядок реакции, задавшись начальными  $c_{0i}$  и конечными  $c_i$  концентрациями реагентов по уравнению формальной кинетики можно рассчитать длительность реакций.

### Кинетика химических реакций.

#### Характеристическое уравнение реактора.

Скорость химической реакции есть изменение (уменьшение или увеличение) числа молей реагентов в результате химического взаимодействия в единицу времени на единицу объема (для гомогенных реакций) или на единицу поверхности (массы) для гетерогенных процессов, В соответствии с этим определением скорость гомогенных химических реакций [кмоль/м<sup>3</sup>сек] равна

$$r = -\frac{1}{V_r} \cdot \frac{dN_i}{d\tau}, \quad (1)$$

где  $N_i$  – число молей исходного  $i$  – го реагента, кмоль,

$V_r$ - объем реакционной массы,

$\tau$  - время реакции.

Для реакций первого порядка, идущих без изменения объема:

при  $V_r = \text{const}$  и  $dN_i = d(c_i V_r)$ ,

где  $c_i$  – концентрация исходного  $i$ -го реагента, кмоль/м<sup>3</sup>,

можно записать:

$$r = -\frac{1}{V_r} \cdot \frac{d(c_i \cdot V_r)}{d\tau} \quad (2)$$

Продифференцировав выражение (2) получим

$$r = -\frac{dc_i}{d\tau} \quad (3)$$

Знак минус указывает на убыль концентрации  $i$ -го компонента. Представляя скорость реакции через константу скорости реакции  $r = kc_i$ , получим:

$$-\frac{dc_i}{d\tau} = kc_i \quad (4)$$

Разделим переменные и проинтегрируем выражение (4), получим:

$$\tau = -\frac{1}{k} \int_{c_{oi}}^{c_i} \frac{dc_i}{c_i} \quad (5)$$

$$\tau = -\frac{1}{k} \cdot \ln c_i \Big|_{c_{oi}}^{c_i} = -\frac{1}{k} [\ln c_i - \ln c_{oi}] = \frac{1}{k} [\ln c_{oi} - \ln c_i] = \frac{1}{k} \cdot \ln \frac{c_{oi}}{c_i}$$

Вводя степень превращения  $x_i = \frac{c_{oi} - c_i}{c_{oi}}$ , получим

$$c_{oi} \cdot x_i = c_{oi} - c_i \quad (6)$$

$$c_i = c_{oi} \cdot (1 - x_i) \quad (7)$$

Тогда

$$-\frac{d(c_{oi} \cdot (1 - x_i))}{d\tau} = k \cdot c_{oi} \cdot (1 - x_i) \quad (8)$$

$$-\frac{dc_{oi}}{d\tau} + c_{oi} \cdot \frac{dx_i}{d\tau} = k \cdot c_{oi} \cdot (1 - x_i) \quad (9)$$

$$\frac{dc_{oi}}{d\tau} = 0, \text{ т.к. } c_{oi} = \text{const.}$$

Разделим переменные и проинтегрируем выражение (9):

$$\int_0^{\tau} d\tau = \frac{1}{k} \int_0^{x_i} \frac{dx_i}{1-x_i} \quad (10)$$

$$\tau = -\frac{1}{k} \cdot \ln(1-x_i)$$

Для реакций других порядков исходное выражение можно записать в общем виде как

$$-\frac{dc_i}{d\tau} = k \cdot c_i^n \quad \text{или} \quad -\frac{dc_i}{d\tau} = k \cdot c_1^{n1} \cdot c_2^{n2} \cdot \dots \cdot c_i^{ni} \quad (11)$$

где  $i$  — количество компонентов, принимающих участие в реакции.

$$c_i^n = c_{oi}^n \cdot (1-x_i)^n \quad (12)$$

$$-\frac{dc_i}{d\tau} = k \cdot c_{oi}^n \cdot (1-x_i)^n \quad (13)$$

Тогда 
$$-\frac{d(c_{oi} \cdot (1-x_i))}{d\tau} = k \cdot c_{oi}^n \cdot (1-x_i)^n \quad (14)$$

$$-\frac{dc_{oi}}{d\tau} + c_{oi} \cdot \frac{dx_i}{d\tau} = k \cdot c_{oi}^n \cdot (1-x_i)^n \quad (15)$$

Т.к. 
$$\frac{dc_{oi}}{d\tau} = 0, \quad \frac{dx_i}{d\tau} = k \cdot c_{oi}^{n-1} (1-x_i)^n \quad (16)$$

Разделим переменные и проинтегрируем выражение:

$$\int_0^{\tau} d\tau = \frac{1}{k \cdot c_{oi}^{n-1}} \int_0^{x_i} \frac{dx_i}{(1-x_i)^n} \quad (17)$$

$$\tau = \frac{1}{k \cdot c_{oi}^{n-1}} \int_0^{x_i} -\frac{d(1-x_i)}{(1-x_i)^n} = -\frac{1}{k \cdot c_{oi}^{n-1}} \int_0^{x_i} (1-x_i)^{-n} d(1-x_i) = -\frac{1}{k \cdot c_{oi}^{n-1} \cdot (-n+1)}$$

$$\left[ (1-x_i)^{-n+1} \right]_0^{x_i} = -\frac{1}{k \cdot c_{oi}^{n-1} \cdot (1-n)} \left[ (1-x_i)^{1-n} - 1 \right] = -\frac{c_{oi}^{1-n}}{k \cdot (1-n)} \left[ (1-x_i)^{1-n} - 1 \right]$$

## Тепловые процессы в химических реакторах периодического действия.

При анализе температурных режимов работы аппаратов принято рассматривать следующие наиболее характерные для АПД случаи:

- изотермический режим, при котором постоянство температуры во всем реакционном объеме аппарата поддерживается за счет достаточно интенсивного теплообмена с окружающей средой, позволяющего подводить или отводить всю выделяемую (поглощаемую) теплоту химической реакции  $T.k.$  при  $T = \text{const}$  значения константы скорости химической реакции  $k$

в соответствующих уравнениях также остаются постоянными, то не требуется записывать и решать дополнительно уравнения тепловых балансов.

- Адиабатический режим предполагает отсутствие теплообмена между зоной реакции и окружающей средой, при этом выделяющаяся за счет реагирования теплота идет на разогрев продуктов при экзотермических реакциях и на охлаждение продуктов при эндотермических реакциях
- реальный промежуточный режим соответствует частичному отводу теплоты реакции. При этом за счет интенсивности теплоотвода возможно регулировать температуру реакционной массы во времени для периодических процессов.
- автотермический режим, при котором теплота реакции используется для поддержания ее температурного режима, т.е. подогрев исходных реагентов происходит продуктами реакции, разогретыми в результате экзотермического процесса.

Таким образом, при  $T \neq \text{const}, k \neq \text{const}$  требуется дополнить кинетические уравнения для расчета длительности химического превращения уравнением теплового баланса. В общем виде тепловой баланс для реактора, в котором протекает экзотермическая реакция, имеет вид:

$$\frac{dQ}{d\tau} = V_r \cdot \rho \cdot C_p \cdot (T_0 - T) + K \cdot F \cdot (T - T_x) - Q_{x.p.} \quad (18)$$

$$\text{теплосодержание системы} = \text{теплоотвод с уходящим потоком} + \text{теплопередача через стенку} - \text{тепло химической реакции}$$

где теплосодержание системы определяется по соотношению

$$dQ = m \cdot C_p \cdot dT = \rho \cdot V_r \cdot C_p \cdot dT \quad (19)$$

тепло химической реакции определяется

$$Q_{x.p.} = h \cdot V_r \cdot k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \cdot c_i \quad (20)$$

где  $T_0$  – начальная температура;

$T_x$  – температура хладагента;

$h$  – теплота экзотермической реакции,  $h = E_2 - E_1$ ;

$E_1, E_2$  - энергии активации прямой и обратной реакции;

$V_r$  - объём реакционной массы;

$c_i$  - концентрация  $i$ -го компонента;

$Q_{x.p.}$  - тепло химической реакции.

Заменяя  $\frac{dQ}{d\tau} = \rho \cdot V_r \cdot C_p \cdot \frac{dT}{d\tau}$  и приравнявая к правой части уравнения (18), и подставив (20) в (18) получим:

$$\rho \cdot V_r \cdot C_p \cdot \frac{dT}{d\tau} = V_r \cdot \rho \cdot C_p \cdot (T_0 - T) + K \cdot F \cdot (T - T_x) - h \cdot V_r \cdot k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \cdot c_i \quad (21)$$

Принимая, что для экзотермической реакции изменение количества тепла в периодическом реакторе  $dQ$  за бесконечно малый промежуток времени  $d\tau$  не происходит отвод тепла с уходящим потоком  $V_r \cdot \rho \cdot C_p \cdot (T_0 - T) = 0$  и для адиабатического режима теплопередача через стенку равна нулю  $K \cdot F \cdot (T - T_x) = 0$ , выражение (21) упрощается. В результате получим систему для совместного решения кинетического уравнения и уравнения теплового баланса

$$\begin{cases} p \cdot C_p \cdot \frac{dT}{d\tau} = -h \cdot k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \cdot c_i \\ -\frac{dc_i}{d\tau} = k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \cdot c_i \end{cases} \quad (22)$$

Совместно решая уравнение системы (22), получим:

$$p \cdot C_p \cdot dT = h \cdot dc_i \quad (23)$$

Проинтегрируем выражение (23):

$$\int_{T_H}^T dT = \frac{h}{p \cdot C_p} \int_{C_{oi}}^{C_i} dc_i$$

интегрируя, получим:

$$T = \frac{h}{p \cdot C_p} \cdot (c_i - c_{oi}) + T_H \quad (24)$$

Подставим значение для температуры реакции во второе уравнение системы (22), получим:

$$-\frac{dc_i}{d\tau} = k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E}{R \left( \frac{h}{p C_p} \cdot (c_i - c_{oi}) + T_H \right)}\right) \cdot c_i \quad (25)$$

Отсюда время реакции с учетом тепловых процессов в реакторе может быть получено путем численного интегрирования следующего выражения:

$$\tau = \int_{C_{oi}}^{C_i} - \frac{dc_i}{k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E}{R \cdot \left( \frac{h}{p C_p} \cdot (c_i - c_{oi}) + T_H \right)}\right) \cdot c_i} \quad (26)$$

### Отгонка (простая перегонка, дистилляция)

В аппаратах периодического действия, как правило, осуществляют процессы постепенной простой перегонки, состоящие в непрерывном испарении жидкой смеси и удалении паров в момент их образования. При периодическом режиме можно получить несколько дистиллятов с разными концентрациями низкокипящих компонентов (НК). Процессы обычно проводят в емкостных аппаратах с рубашками, мешалками, причем аппарат по форме должен приближаться к кубу, т.е. D:H ≈ 1:1.

Если в аппарат первоначально загружено  $W_1$  кмоль бинарной смеси с концентрацией НК  $x_1$ , непрерывно притекает  $W_1'$  кмоль/с той же смеси, отводится  $D_1'$  кмоль/с паров (дистиллята).

По истечении времени  $\tau$  количество жидкости в аппарате составит:

$$W = W_1 + (W_1' - D_1') * \tau = W_1 + D_1' * \left( \frac{W_1'}{D_1'} - 1 \right) * \tau \quad (27)$$

или

$$W = W_1 + \frac{W_1'}{\mu'} (\mu' - 1) * \tau \quad (28)$$

Обозначим  $\frac{W_1'}{D_1'} = \text{const} = \mu'$ , тогда  $W = W_1 + D_1' * (\mu' - 1) * \tau$

Дифференцируя (28), получим:

$$dW = \left[ \frac{(\mu' - 1)}{\mu'} \right] * W_1' * d\tau \quad (29)$$

Обозначим через  $x$  и  $y$  мгновенные равновесные концентрации жидкой и паровой фазы в аппарате, запишем уравнение материального баланса по НК:

$$d(Wx) = (W_1' * x_1 - D_1' * y) * d\tau = W_1' * \left( x_1 - \frac{y}{\mu'} \right) * d\tau \quad (30)$$

Выразим  $W_1' * d\tau$  из (29):

$$W_1' * d\tau = \frac{dW}{\left[ \frac{(\psi-1)}{\psi} \right]}$$

подставим полученное выражение в (30):

$$d(Wx) = \frac{dW}{\left[ \frac{(\psi-1)}{\psi} \right]} * \left( x_1 - \frac{y}{\psi} \right) = \frac{\psi}{(\psi-1)} * \left( x_1 - \frac{y}{\psi} \right) * dW \quad (31)$$

преобразуем (31) к следующему виду:

$$x * dW + W * dx = \frac{\psi}{(\psi-1)} \left( x_1 - \frac{y}{\psi} \right) * dW \quad (32)$$

Отсюда выразим  $W * dx$ :

$$W * dx = \left[ \frac{\psi}{(\psi-1)} \left( x_1 - \frac{y}{\psi} \right) - x \right] * dW = \left[ \frac{(\psi * x_1 - y)}{\psi - 1} - x \right] dW$$

Разделим переменные и проинтегрируем полученное выражение:

$$\int_{W_1}^{W_2} \frac{dW}{W} = \int_{x_1}^{x_2} \frac{(\psi-1) * dx}{\psi * x_1 - y - (\psi-1) * x} \quad (33)$$

$$\frac{1}{\psi-1} * \ln \frac{W_1}{W_2} = \int_{x_2}^{x_1} \frac{dx}{y + (\psi-1) * x - \psi * x_1}$$

$W_2$  – количество кубового остатка.

В частном случае, когда количество притекающей жидкости и количество отводимого дистиллята равны  $W_1' = D_1'$ , то  $W_1 = W_2 = \text{const}$  и уравнение (30) принимает вид:

$$W_1 * dx = W_1' * (x_1 - y) * d\tau \quad (34)$$

откуда

$$\frac{W_1'}{W_1} * \tau = \int_{x_2}^{x_1} \frac{dx}{y - x_1} \quad (35)$$

откуда

$$\tau = \frac{W_1}{W_1'} * \int_{x_2}^{x_1} \frac{dx}{y - x_1} \quad (36)$$

Если в аппарат одновременно загружается  $W_1$  кмоль исходной жидкой смеси и в процессе отгонки она больше не притекает, т.е.  $W_1' = 0$  и  $\tau = 0$ , то из уравнения (33) получим:

$$\ln \frac{W_1}{W_2} = \int_{x_2}^{x_1} \frac{dx}{y - x} \quad (37)$$

если  $y = m * x$ , то

$$\ln \frac{W_1}{W_2} = \int_{x_2}^{x_1} \frac{dx}{m * x - x} = \int_{x_2}^{x_1} \frac{dx}{x * (m - 1)}$$

Уравнения (33), (36), (37) решают графическим способом, причем равновесные концентрации  $x$  и  $y$  берутся из диаграммы фазового равновесия, и позволяют рассчитать  $W_2$  при заданном  $x_2$ .

В периодических процессах отгонки концентрация НК в дистилляте уменьшается по мере исчерпывания этого компонента в кубовой жидкости. Среднюю концентрацию  $y_{cp}$  можно определить из уравнения материального баланса.

$$(W_1 + W_1' * \tau) * x_1 = W_2 * x_2 + (W_1 + W_1' * \tau - W_2) * y_{cp} \quad (38)$$

откуда

$$y_{cp} = \frac{[(W_1 + W_1' * \tau) * x_1 - W_2 * x_2]}{W_1 + W_1' * \tau - W_2} \quad (39)$$

Если процесс идет без притока исходной жидкости  $W_1' = 0$ , то

$$y_{cp} = \frac{(W_1 * x_1 - W_2 * x_2)}{W_1 - W_2} \quad (40)$$

Расход тепла  $Q$  на рассматриваемый процесс отгонки определяется из уравнения теплового баланса:

$$Q + (W_1 + W_1' * r) * i_x' = W_2 * i_x'' + (W_1 + W_1 * r - W_2) * i_d \quad (41)$$

где  $i_x'$ ,  $i_x''$  - энтальпии исходной жидкой смеси и кубового остатка,

$i_d$  - энтальпия паров дистиллята.

В случае  $W_1' = 0$  получим:

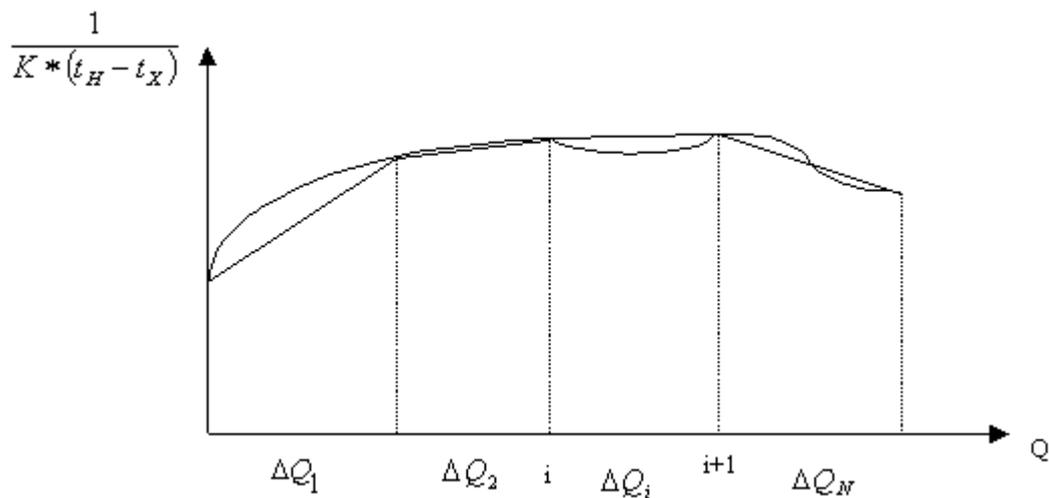
$$Q + W_1 * i_x' = W_2 * i_x'' + (W_1 - W_2) * i_d \quad (42)$$

При определении величины поверхности нагрева аппарата периодического действия  $F$  следует помнить, что процесс протекает в условиях нестационарного конвективного теплообмена, т.е. при непрерывном росте температуры кипения жидкости  $t_x$  и падении коэффициента теплопередачи  $K$ . Если куб обогревается конденсирующимся паром с температурой насыщения  $t_{нас}$ , то поверхность нагрева  $F$  и продолжительность процесса  $\tau$  связаны следующими уравнением:

$$dQ = K * F * (t_{нас} - t_x) * d\tau$$

$$\text{откуда} \quad F * \tau = \int_0^Q \frac{dQ}{K * (t_{нас} - t_x)} \quad (43)$$

Т.к. зависимости  $K$  и  $t_x$  от  $Q$  очень сложны, то расчет по уравнению (43) проводят графически.



$$\Delta Q_1 = \Delta Q_2 = \dots = \Delta Q_i = \dots = \Delta Q_N,$$

где N – число точек разбиения.

$$F * \tau = \sum_{i=1}^N S_{\text{трапеци}},$$

где 
$$S_{\text{трапеци}} = \frac{\frac{1}{K_i * (t_{\text{нас}i} - t_{xi})} + \frac{1}{K_{i+1} * (t_{\text{нас}i+1} - t_{xi+1})}}{2} * \Delta Q_i$$

$$F * \tau \approx \left( \frac{1}{K_1 * (t_{\text{нас}} - t_{x1})} + \frac{1}{K_N * (t_{\text{нас}} - t_{xN})} \right) * \frac{\Delta Q_i}{2} + \sum_{i=2}^{N-1} \frac{\Delta Q_i}{K_i * (t_{\text{нас}} - t_{xi})} \quad (44)$$

**Математическая формулировка задачи синтеза гибких химико-технологических систем в условиях неопределенности целей и исходной информации.**

**Общие положения теории массового обслуживания (ТМО).  
Схема "гибели" и "размножения" для моделирования и синтеза гибких ХТС**

Рассмотренная ранее задача синтеза гибкой ХТС соответствовала так называемому детерминированному варианту. В этом случае предполагалось, что в любой момент времени на входе ХТС имеется сырье всех видов в количестве, достаточном для организации любых допустимых комбинаций технологических процессов. Предполагалось также, что длительность технологического цикла любого аппарата

периодического действия, входящего в состав ХТС, при реализации любого технологического процесса постоянна или известная функция объема перерабатываемой массы  $q_{ij}$ , то есть  $q_{ij} = \text{const}$  или  $q_{ij} = f(q_{ij})$ , но

$$v_{ij} = s_{ij} \cdot q_{ij} \Rightarrow \tau_{ij} = f(q_{ij}); \quad i = \overline{1, N}; \quad j = \overline{1, l_1}$$

где  $s_{ij}$  — постадийный материальный индекс (расходные нормы сырья на единицу выпускаемой продукции), м<sup>3</sup>/кг;  $q_{ij}$  — размер партии (полу) продукта на стадии, кг.

На практике, из-за возмущений в системе вышеупомянутые допущения не соблюдаются, так как сырье поступает на вход ХТС в случайные моменты времени и, следовательно, длительность технологических циклов работы аппаратов — случайная величина. В этом случае синтез осуществляется в условиях стохастической неопределенности, то есть интервал времени между поступлениями партий сырья (полупродуктов) на вход произвольной аппаратурной стадии ХТС и времена пребывания перерабатываемой массы в аппаратурной стадии — случайные величины. Для решения задачи синтеза гибкой ХТС в этом случае необходимо знать закон распределения случайных величин. Тогда, используя аппарат теории массового обслуживания, представляется возможным синтезировать некоторый оптимальный вариант гибкой ХТС в условиях неопределенности.

*Теория массового обслуживания* — это раздел математики, изучающий случайные процессы, происходящие в так называемых системах массового обслуживания (СМО), то есть системах, предназначенных для обслуживания заявок, поступающих в случайные моменты времени.

Установим соответствие между терминами теории массового обслуживания и технологическими терминами:

- многостадийная ХТС со сложным аппаратурным оформлением соответствует многофазной СМО;
- стадия ХТС — это фаза СМО;
- партии сырья или полупродуктов, поступающие на вход стадии  $j$  для производства продукта  $i$ , образуют  $i$ -й поток заявок (требований);
- так как каждая стадия ХТС образована однотипными работающими аппаратами, то в терминах теории массового обслуживания —

это *многоканальная СМО*, где *канал* — это аппарат периодического действия (АПД).

Простейшая СМО марковского типа должна удовлетворять следующим свойствам:

*Стационарность* заключается в том, что вероятность появления  $K$ -й партии сырья или полупродуктов на входе произвольной ХТС за фиксированный промежуток времени  $\tau$  не зависит от времени. Если это свойство не выполняется для всего планового срока  $T_{пл}$ , то плановый срок можно разбить на интервалы, на каждом из которых это условие выполняется.

*Отсутствие последействия* означает, что вероятность поступления любых  $K$  партий сырья или полупродуктов за интервал времени  $\tau$  не зависит от порядка их поступления в ХТС до этого интервала времени.

*Свойство ординарности* заключается в пренебрежимой малости вероятности одновременного поступления более чем одной партии сырья или полупродуктов на вход ХТС или любой из ее стадий.

Пусть процесс поступления сырья на вход ХТС (или полупродуктов на стадии) имеет распределение Пуассона с параметрами  $\lambda_{ij}$ ,  $i=1, \dots, N; j=1, \dots, M$ .

Тогда *вероятность поступления  $K$  партий сырья за время  $\tau$*  будет:

$$P_{K_{ij}}(\tau) = \frac{(\lambda_{ij} \cdot \tau)^{K_{ij}}}{K_{ij}!} \cdot e^{-\lambda_{ij} \cdot \tau} \quad (2)$$

Простейший вариант

$$P_{K_{ij}} = \lambda_{ij} \cdot e^{-\lambda_{ij} \cdot \tau} \quad (3)$$

где  $\lambda_{ij}$  — интенсивность поступления партий сырья на стадию  $j$  при производстве продукта  $i$  (число партий сырья в единицу времени).

Пусть длительность технологических циклов работы аппаратов стадии  $j$  подчиняется показательному закону распределения случайных

$$\mu_{ij} = N_j \cdot \frac{1}{\tau_{ij}}$$

величин с показателем  $\lambda_{ij}$ , причем  $\tau_{ij}$  — среднее время производства одной партии продукта  $i$  на стадии  $j$ , состоящей из

$N_j$  параллельных аппаратов, то есть — это величина обратная длительности технологического цикла аппарата.

Введем понятие *приведенной интенсивности* поступления полупродуктов на вход стадии  $j$  при производстве продукта  $i$ . Обозначим

$$\rho_{ij} = \frac{\lambda_{ij}}{\mu_{ij}}$$

ее через  $\rho_{ij}$ , тогда  $\mu_{ij}$  — среднее число партий полупродукта, поступающего на стадию  $j$  за среднее время производства одной партии продукта  $i$  на стадии  $j$ .

Будем рассматривать СМО без управления. Что это значит? Партии полупродуктов на любой стадии  $j$  имеют равную вероятность попасть в любой из  $N_j$  аппаратов стадии.

Справедливо и обратное — равная вероятность любого из  $N_j$  аппаратов принять поступившую партию.

Условие стационарности СМО характеризуется тем, что  $\rho_{ij}$  (приведенная интенсивность) потоков всех полупродуктов меньше 1.

$$\rho_{ij} < 1; \quad j \in M(i), \quad (4)$$

где  $M(i)$  — стадии производства продукта  $i$ .

Если в синтезируемой ХТС отсутствуют емкости между основными стадиями для временного хранения сырья (полупродуктов), что соответствует СМО с отказами, то при поступлении некоторой партии сырья на технологическую стадию  $j$ , если все аппараты заняты, сырье не может быть переработано. Этот вариант ХТС не представляет практического интереса из-за его ограничений работоспособности.

При наличии вспомогательных емкостей сырье (полупродукты) может находиться в них некоторое время, прежде чем будет переработано в одном из аппаратов стадии. Этот вариант ХТС соответствует *СМО с очередью*.

Если объемы вспомогательных емкостей конечны, то говорят о *СМО с ограниченной очередью*.

Если объемы вспомогательных емкостей бесконечны, то говорят *СМО с неограниченной очередью*, многостадийная ХТС представляет собой многофазную *СМО без последействия*, то есть каждая стадия (фаза СМО) может рассматриваться как *независимая*. Синтез

многостадийной ХТС сводится к *независимому синтезу многостадийных ХТС* в условиях стохастической неопределенности.

Очевидно, что на практике используются ХТС с вспомогательными емкостями конечного объема. В этом случае рассматривать стадии как независимые, вообще говоря, нельзя. Однако если считать, что объемы емкостей значительно превосходят объемы поступающей в них массы за одну операцию, то в первом приближении для синтеза ХТС можно использовать *теорию СМО с неограниченной очередью*.

Перед формулировкой задачи синтеза ХТС в стохастическом варианте определим некоторые *характеристики эффективности ХТС, рассматриваемой как СМО*.

1. **Абсолютная производительность ХТС**,  $A$ , определяется как среднее число партий сырья (полупродукта), перерабатываемых в единицу времени (для гибкой ХТС величина  $A$  определяется для каждого продукта), то есть

$$A = \frac{1}{\tau, \text{ч}^{-1}}. \quad (5)$$

2. **Относительная производительность** или отношение абсолютной производительности к интенсивности поступления сырья. Эта характеристика определяет вероятность переработки партии сырья (полупродукта).

3. **Среднее время пребывания партии сырья или полупродукта** в основных технологических аппаратах или промежуточных емкостях — это длительность технологической стадии.

4. **Среднее число занятых аппаратов или коэффициент загрузки оборудования** — это отношение работающих аппаратов схемы к общему их количеству.

5. **Среднее число партий сырья, одновременно находящееся в ХТС**, — это сырье, находящееся в основных аппаратах и емкостях.

И, наконец, если интенсивность входного потока сырья или полупродукта не зависит от состояния ХТС, то такая ХТС рассматривается как *СМО открытого типа*.

Теперь для лучшего понимания смысла задачи синтеза в условиях неопределенности поступления сырья обратимся к простейшей одностадийной ХТС.

Обозначим  $S_0, S_1, \dots, S_1, \dots, S_n$  — состояния системы, число которых конечно и равно,  $(n + 1)$ , где

$$\begin{cases} n - \text{число состояний;} \\ S_0 - \text{начальное состояние.} \end{cases}$$

Вероятности пребывания системы в состояниях  $S_0, S_1, \dots, S_1, \dots, S_n$  равны соответственно  $P_0, P_1, \dots, P_1, \dots, P_n$ . Значения этих вероятностей должны быть заданы в начальный момент времени  $t=0$ , так как это характеризует текущее состояние системы. Когда в момент  $t=0$  система находится в состоянии  $S_i$  — это означает, что  $P_i(0) = 1$ , а остальные вероятности равны нулю.

Когда в системе процесс длится некоторое время, то можно говорить о предельном (стационарном) состоянии системы  $P_i(\tau)$ , то есть при  $\tau \rightarrow \infty$ .

В системах с простейшими потоками событий (например, стационарные пуассоновские с постоянной интенсивностью  $\lambda_i$ ) могут существовать

$$P_i = \lim_{\tau \rightarrow \infty} P_i(\tau)$$

финальные вероятности .

Это означает, что при  $\tau \rightarrow \infty$  в системе устанавливается предельный стационарный режим. В этом случае финальная вероятность  $P_i(\infty)$  имеет смысл среднего относительного времени пребывания системы в данном состоянии.

Система, имеющая финальные вероятности, называется *эргодической*, а протекающий в ней процесс — эргодическим процессом.

Финальные вероятности получаются в результате решения системы алгебраических уравнений при нулевых значениях производных в уравнениях Колмогорова, составляемых в соответствии со следующим правилом: *производная вероятности каждого состояния равна сумме всех потоков вероятностей, идущих из данного состояния в другие.*

Например, для схемы "гибели" и "размножения" (рис.1):

$$\begin{aligned} \frac{dP_0}{dt} &= \mu_1 P_1 - \lambda_0 P_0; \\ \frac{dP_1}{dt} &= \lambda_0 P_0 + \mu_2 P_2 - \lambda_1 P_1 - \mu_1 P_1; \\ &\dots\dots\dots \\ \frac{dP_n}{dt} &= \lambda_{n-1} P_{n-1} - \mu_n P_n. \end{aligned} \tag{6}$$

Приравнявая значения производных нулю (стационарное состояние), получим систему алгебраических уравнений, из которых находятся выражения для расчета значений финальных вероятностей.

Схема "гибели" и "размножения" хорошо моделирует совмещенные и гибкие ХТС периодического действия стохастического типа.

Рассмотрим модель "гибели" и "размножения" (рис. 1).

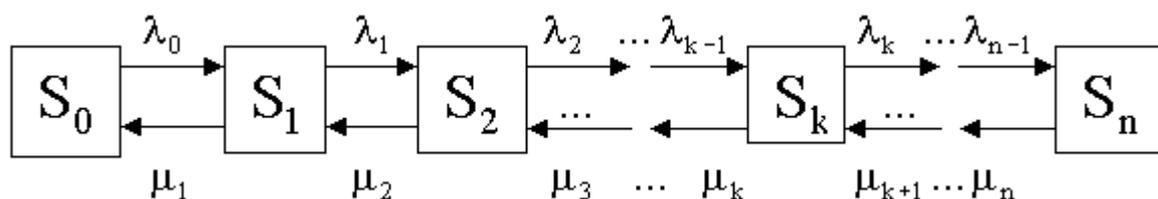


Рис. 1. Схема "гибели" и "размножения"

Если все состояния системы можно представить в виде цепи, в которой каждое звено (состояние) связано с двумя соседними прямой и обратной связью, то такая схема называется схемой "гибели" и "размножения".  
 Переход вправо моделирует процесс размножения, влево — гибели.  
 Характеристики процесса:  $\lambda$  - интенсивность размножения,  $\mu$  - интенсивность гибели.

Финальные вероятности для схемы "гибели" и "размножения" определяются по соотношениям (7-11) при  $\frac{dP_i}{dt} = 0$ :

$$P_1 = \frac{\lambda_0}{\mu_1} P_0; \tag{7}$$

$$P_2 = \frac{\lambda_1}{\mu_2} P_1 = \frac{\lambda_0 \lambda_1}{\mu_1 \mu_2} P_0; \tag{8}$$

.....

$$P_k = \frac{\lambda_0 \lambda_1 \dots \lambda_{k-1}}{\mu_1 \mu_2 \dots \mu_k} P_0 ; \quad (9)$$

.....

$$P_n = \frac{\lambda_0 \lambda_1 \dots \lambda_{n-1}}{\mu_1 \mu_2 \dots \mu_n} P_0 ; \quad (10)$$

$$\sum_{i=0}^n P_i = 1 ; \quad (11)$$

Из условия (11) получаем:

$$P_0 = \left\{ 1 + \frac{\lambda_0}{\mu_1} + \frac{\lambda_0 \lambda_1}{\mu_1 \mu_2} + \dots + \frac{\lambda_0 \lambda_1 \dots \lambda_{n-1}}{\mu_1 \mu_2 \dots \mu_n} \right\}^{-1} . \quad (12)$$

Таким образом, вероятность любого состояния системы равна дроби, в числителе которой — произведение всех интенсивностей "размножения", стоящих левее  $S_k$ , а в знаменателе — произведение всех интенсивностей "гибели", стоящих левее  $S_k$ , умноженное на вероятность крайнего левого (начального) состояния.

**Пример** (стохастическая модель). Рассмотрим одностадийную ХТС, представленную на рис. 2, производящую один продукт.

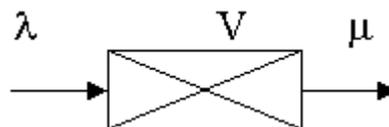


Рис. 2. Схема одностадийной ХТС

Сырье поступает случайным образом, следовательно, длительность  $\tau$  тоже случайная величина. Возьмем в качестве закона поступления сырья на вход закон Пуассона:

$$f(\tau) = \lambda e^{-\lambda \tau} . \quad (13)$$

Интервал времени поступления сырья — это число партий в единицу времени, изменяется по закону Пуассона,  $\lambda$  — интенсивность поступления сырья,  $\mu$  — интенсивность переработки сырья, которая находится как:

$$\mu = \frac{1}{\tau}. \quad (14)$$

Запишем для нашего случая модель "гибели" и "размножения". Будем различать два состояния:  $S_0$  – аппарат пустой,  $S_1$  – аппарат перерабатывает массу.

В данном случае не будем учитывать загрузку, включение мешалки и т.д. (дифференциальная оценка), а берем интегральную оценку. Тогда схема "гибели" и "размножения" будет иметь вид, представленный на рис. 3.

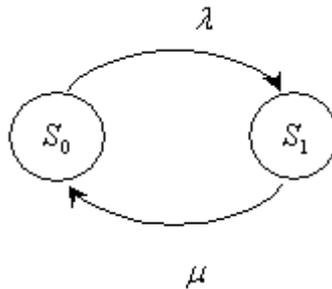


Рис. 3. Схема процесса к примеру

Запишем уравнение Колмогорова, характеризующее изменение вероятности нахождения системы в том или ином состоянии:

$$\begin{aligned} \frac{dP_0}{d\tau} &= \mu P_1 - \lambda P_0; \\ \frac{dP_1}{d\tau} &= \lambda P_0 - \mu P_1; \\ P_0 + P_1 &= 1, \end{aligned} \quad (15)$$

где  $P_0, P_1$  — вероятности нахождения системы в состояниях  $S_0$  и  $S_1$ .

Решаем систему уравнений (15) относительно  $P_0$  и  $P_1$ . Запишем выражение для  $P_0$ , учитывая что  $P_1 = 1 - P_0$ .

$$\frac{dP_0}{d\tau} + P_0(\lambda + \mu) = \mu. \quad (16)$$

Таким образом получаем неоднородное дифференциальное уравнение первого порядка. Решаем уравнение (16) методом вариации постоянных. Находим решение однородного уравнения

$$\frac{dP_0}{d\tau} + P_0(\lambda + \mu) = 0 \quad (17)$$

Разделяем переменные

$$\frac{dP_0}{P_0} = -(\lambda + \mu)d\tau \quad (18)$$

и записываем решение в виде

$$\ln P_0 - \ln C(\tau) = -(\lambda + \mu)\tau \quad (19)$$

Тогда выражение для  $P_0$  запишется

$$P_0 = C(\tau) \cdot e^{-(\lambda + \mu)\tau} \quad (20)$$

Теперь дифференцируем выражение для  $P_0$ .

$$\frac{dP_0}{d\tau} = \frac{dC(\tau)}{d\tau} \cdot e^{-(\lambda + \mu)\tau} - C(\tau)(\lambda + \mu)e^{-(\lambda + \mu)\tau} \quad (21)$$

Подставляем выражения (20) и (21) в уравнение (16).

$$\frac{dC(\tau)}{d\tau} \cdot e^{-(\lambda + \mu)\tau} - C(\tau)(\lambda + \mu)e^{-(\lambda + \mu)\tau} + C(\tau)(\lambda + \mu)e^{-(\lambda + \mu)\tau} \quad (22)$$

Упрощаем и разделяем переменные для определения  $C(\tau)$ .

$$dC(\tau) = \mu \cdot e^{(\lambda + \mu)\tau} d\tau; \quad (23)$$

$$C(\tau) = \frac{\mu}{\lambda + \mu} e^{(\lambda + \mu)\tau} + \text{const} \quad (24)$$

Тогда

$$P_0 = C(\tau)e^{-(\lambda + \mu)\tau} = \left( \frac{\mu}{\lambda + \mu} e^{(\lambda + \mu)\tau} + \text{const} \right) e^{-(\lambda + \mu)\tau} \quad (25)$$

$$P_0 = \frac{\mu}{\lambda + \mu} + e^{-(\lambda + \mu)\tau} \cdot \text{const} \quad (26)$$

Используя начальные условия:  $\tau=0$ ;  $P_0=1$  — находим значение const.

$$1 = \frac{\mu}{\lambda + \mu} + \text{const} \Rightarrow \text{const} = \frac{\lambda}{\lambda + \mu} \quad (27)$$

Тогда значения вероятностей запишутся в следующем виде:

$$P_0(\tau) = \frac{\mu}{\mu + \lambda} \left[ 1 + \frac{\lambda}{\mu} e^{-(\lambda + \mu)\tau} \right]; \quad (28)$$

$$P_1(\tau) = \frac{\lambda}{\mu + \lambda} \left[ 1 - e^{-(\lambda + \mu)\tau} \right] \quad (29)$$

Так как нас интересует предельное состояние  $\tau \rightarrow \infty$ , то необходимо осуществить предельный переход:

$$P_0(\infty) = \lim_{\tau \rightarrow \infty} P_0(\tau) = \frac{\mu}{\lambda + \mu}; \quad (30)$$

$$P_1(\infty) = \lim_{t \rightarrow \infty} P_1(t) = \frac{\lambda}{\lambda + \mu}. \quad (31)$$

Найденные вероятности позволяют определить интенсивность переработки. По определению

$$A = \lambda P_0 = \lambda \cdot \mu / (\lambda + \mu) \quad (32)$$

Затем по соотношению для расчета времени, находим:

$$T = \frac{PR}{qA} \text{ ч.} \quad (33)$$

Для решения задачи необходимы параметры  $\mu$  и  $\lambda$ . Откуда их брать? Величину  $\lambda$  определяем из статистических данных поступления сырья. Постулируем закон распределения и считаем математическое ожидание, то есть среднюю длительность (интервал) поступления сырья  $\bar{\tau}_c$ . Тогда

$$\lambda = \frac{1}{\text{средняя длительность поступления сырья}} = \frac{1}{\bar{\tau}_c}, \quad (34)$$

$$\bar{\tau}_c = M(\tau) = \frac{\sum_{i=1}^K \tau_i}{K}, \quad (35)$$

где

где  $M(\square)$  — математическое ожидание,  $K$  — количество партий сырья.

Напомним, что интенсивность переработки сырья определяется средней длительностью переработки массы на стадии  $\bar{\tau}$ :

$$\mu = \frac{1}{\bar{\tau}}. \quad (36)$$

Этот вариант не имеет практического интереса, т.к. в случае занятости аппарата поступившее сырье (полупродукт) не может быть переработано. Чтобы этого не произошло на входе системы должна находиться емкость для хранения сырья.

Поэтому рассмотрим случай многостадийной ХТС с вспомогательными емкостями конечного объема и сформулируем математическую постановку задачи синтеза в условиях неопределенности поступления сырья.

Стадии ХТС, каждая из которых состоит из  $N_j$  основных технологических аппаратов и  $N_j$  вспомогательных емкостей (по числу продуктов), являются независимыми, и задача синтеза  $M$ -стадийной ХТС сводится к задаче синтеза  $M$  одностадийных ХТС.

Возьмем произвольную стадию  $j$  многостадийной химико-технологической системы. Пусть известен размер партии, а следовательно объем перерабатываемой массы в аппарате  $v_{ij} = s_{ij}q_i$ , л. и стадия представлена одинаковыми параллельными аппаратами  $N_j$ .

Задана производительность ХТС по продукту  $i$  в течение планового периода  $T_{пл}$ . Известны также интенсивность поступления промежуточных продуктов  $\lambda_{ij}$ ; среднее время технологического цикла аппарата при производстве продукта  $i$  —  $\bar{\tau}_{ij}$ . Тогда  $\mu_{ij} = N_{ij} / \bar{\tau}_{ij}$ . На входе ХТС установлены емкости.

Требуется определить оптимальные значения  $N_{ij}^{*opt}, V_{ij}^{*opt}, V_{ij}^{*opt}$  (количество аппаратов и размеры аппаратов и согласующих емкостей), при которых капитальные затраты были бы минимальными.

### Запишем математическую постановку задачи

Предположим для простоты, что число партий каждого продукта  $n_i$  определяется объемом партии сырья, поступающего на вход ХТС, и что сырье поступает партиями одинакового размера.

Так как постадийные материальные индексы  $s_{ij}$  считаются известными (из материального баланса), то известны и объемы массы, перерабатываемой в одном аппарате каждой стадии:

$$q_i = \text{const}, \quad v_{ij} = s_{ij} q_i. \quad (37)$$

Если пренебречь пусковым периодом работы ХТС и периодом останова, а рассматривать стационарный режим работы и предположить, что объем перерабатываемой массы произволен, то задача синтеза ХТС примет вид:

$$\min \left( \sum_{j=1}^M N_{ij} \alpha_j V_j^{\beta_j} + N_{ij} \sum_{j=1}^{M-1} a_j V_{ij}^{b_j} \right), \quad (38)$$

где  $\alpha_j, \beta_j, a_j, b_j$  — эмпирические константы.

Объем аппарата:

$$\max \left\{ \frac{v_{ij} N_{ij}}{\varphi_{ij}} \right\} \leq V_j \leq \min \left\{ \frac{v_{ij} N_{ij}}{\varphi_{ij}} \right\}. \quad (39)$$

Объем емкости определяется условием:

$$\left\{ \frac{v_{ij}}{\varphi_{ij}} \cdot N_{ij} \right\} \leq V_{ij} \leq \left\{ \frac{v_{ij}}{\varphi_{ij}} \cdot N_{ij} \right\}, \quad (40)$$

где  $v_{ij}$  — объем перерабатываемой массы на одну партию продукта  $i$  на стадии  $j$ ,  $\varphi_{ij}$  — коэффициент заполнения емкости для хранения сырья на

стадии  $j$  при производстве продукта  $i$ ,  $N'_{ij}$  — количество партий сырья хранимое в емкости.

При следующих ограничениях:

$$T = \sum_{i=1}^N \frac{PR_i}{q_i A_i} \leq T_{\text{пл}} \quad (41)$$

$$A_i = \min_{j \in M} \{A_{ij}\} \quad (42)$$

где

а величина  $A_{ij}$  определяется как:

$$A_{ij} = \lambda_{ij} \left( 1 - P_{N_{ij} + N'_{ij}} \right) \quad (43)$$

где  $P_{N_{ij} + N'_{ij}}$  — вероятность того, что аппарат  $N_j$  занят и в емкости хранится  $N'_{ij}$  партий сырья (вероятность отказа).

Расчет вероятностей осуществляется по следующим соотношениям:

$$P_{0ij} = \left\{ 1 + \frac{\rho_{ij}}{1!} + \dots + \frac{\rho_{ij}^{N_j}}{N_j!} + \frac{\rho_{ij}^{N_j + N'_{ij}}}{N_j! N'_{ij}} \cdot \frac{1 - \chi_{ij}^{N'_{ij}}}{1 - \chi_{ij}} \right\}^{-1} \quad (44)$$

$$P_{k_{ij}} = \frac{\rho_{ij}^{k_{ij}}}{k_{ij}!} P_{0ij} \quad ; \quad 1 \leq k_{ij} \leq N_j \quad (45)$$

$$P_{N_j + r_{ij}} = \frac{\rho_{ij}^{N_j + r_{ij}}}{N_j! N'_{ij}^{r_{ij}}} P_{0ij} \quad ; \quad 1 \leq r_{ij} \leq N'_{ij} \quad (46)$$

где  $k_{ij}$  — количество параллельных аппаратов на стадии,  $r_{ij}$  — количество партий сырья, поступающего в емкость.

Причем

$$\mu_{ij} = N_j \frac{1}{\bar{\tau}_{ij}}; \quad (47)$$

$$\rho_{ij} = \frac{\lambda_{ij}}{\mu_{ij}}; \quad (48)$$

$$x_{ij} = \frac{\rho_{ij}}{N_j}. \quad (49)$$

Формулировку задачи необходимо дополнить требованием дискретности размеров оборудования; целочисленности числа аппаратов, емкостей и партий продукта в течение планового периода  $T_{\text{пл}}$ .

*Общая форма записи дискретности и целочисленности:*

$$\prod_{l_j=1}^{L_j} (V_j - V_{l_j}) = 0; \quad (50)$$

$$\prod_{f_j=1}^{F_j} (N_j - N_{f_j}) = 0; \quad (51)$$

$$\prod_{g_{ij}}^{G_j} (n_j - n_{g_{ij}}) = 0; \quad (52)$$

$$\prod_{l'_j=1}^{L'_j} (V'_j - V'_{l'_j}) = 0; \quad (53)$$

где  $L_j$ ,  $F_j$ ,  $G_j$ ,  $L'_j$  — количество типоразмеров в ряду нормализованных аппаратов основного оборудования; число параллельных аппаратов на стадии; количество партий производимых продуктов и количество типоразмеров согласующих емкостей, соответственно ( $j = \overline{1, M}$ ).

Выражения (38-53) характеризуют математическую формулировку задачи синтеза в условиях неопределенности (стохастический вариант).

Пример сравнительного расчета ХТС с заданной производительностью

1. Пусть задана одностадийная схема производства продукта. Объем аппарата  $V=6,3 \text{ м}^3$  (реактор с мешалкой). Материальный индекс по продукту составляет  $s=1 \text{ м}^3/\text{т}$  продукта. Коэффициент заполнения

аппарата  $\eta = 0,8$ . Время технологического цикла работы аппарата равно 3 ч. Сколько потребуется времени для производства 100 т продукта?

### **Решение**

Согласно определению абсолютной производительности  $A$ , его величина составит

$$A = 1/\bar{\tau} = 1/3 = 0,33 \text{ ч}^{-1}$$

Время выпуска продукции находим как:

$$T = PR/(q \cdot A)$$

Таким образом, для определения времени необходимо вычислить количество перерабатываемой массы за один цикл, величина которой зависит от размера аппарата и материального индекса, т.е. определяется размером партии продукта  $q$ .

Значение  $q$  находим из соотношения  $sq = \eta = V \cdot \eta$ :

$$q = v/s = V \cdot \eta$$

Тогда, время выпуска продукции с учетом подстановки и преобразований, составит:

$$T = PR \cdot s / (V \cdot \eta \cdot A) = 100 \cdot 1 \cdot 3 / (6.3 \cdot 0.8 \cdot 1) = 62.5 \text{ ч.}$$

2.Теперь рассмотрим стохастический вариант схемы, у которой подача сырья осуществляется случайным образом (отсутствует емкость для хранения сырья).

Тогда, если сырье поступило, а аппарат занят, то оно не может быть переработано и ожидает момента, когда аппарат освободится!

Запишем условия задачи в терминах теории массового обслуживания (система с отказами).

**Исходные данные** аналогичны, но сырье поступает с частотой  $\lambda = 0.4$  партии/ч (статистические данные, соотношения (34-35)).

### **Решение**

Для решения задачи необходимо знание законов поступления сырья и его переработки (продолжительность технологического цикла производства продукта). Опишем оба процесса законом Пуассона:

$$f(\tau) = \lambda \cdot e^{-\lambda\tau}$$

Если допускается экспоненциальный закон поступления и переработки, то можно получить решение по модели "гибели" и "размножения". Система в нашем случае имеет два состояния:  $S_0$  — аппарат пустой и  $S_1$  — аппарат работает. Интенсивность перехода из состояния в состояние характеризуется параметрами  $\lambda$  и  $\mu$ .

Изменение вероятности нахождения системы в том или ином состоянии характеризуется уравнением Колмогорова, которое запишется в соответствии с моделью "гибели" и "размножения" в виде:

$$\begin{aligned} \frac{dP_0}{dt} &= -\lambda P_0 + \mu P_1; \\ \frac{dP_1}{dt} &= \lambda P_0 - \mu P_1; \\ P_0 + P_1 &= 1 \end{aligned}$$

при следующих начальных условиях:  $P_0=0$ ;  $P_1=1$ .

Преобразуя систему и решая неоднородное дифференциальное уравнение 1 порядка, получаем (см. решение уравнений (16-29)):

$$\begin{aligned} P_0(\tau) &= \frac{\mu}{\lambda + \mu} \left[ 1 + \frac{\lambda}{\mu} \cdot e^{-(\lambda + \mu)\tau}; \right] \\ P_1(\tau) &= \frac{\lambda}{\lambda + \mu} \left[ 1 - e^{-(\lambda + \mu)\tau} \right]. \end{aligned}$$

Нас интересует стационарное состояние системы, т.е. при  $\tau \rightarrow \infty$ .

Находим это предельное состояние (значения вероятностей  $P_0$  и  $P_1$ ).

$$P_0 = \lim_{\tau \rightarrow \infty} P_0(\tau) = \mu / (\lambda + \mu) \text{ и } P_1 = \lim_{\tau \rightarrow \infty} P_1(\tau) = \lambda / (\lambda + \mu)$$

Абсолютная производительность  $A$  составит:

$$A = \lambda P_0 = \lambda \mu / (\lambda + \mu) = 0.4 \cdot 0.33 / 0.73 = 0.18 \text{ ч}^{-1}.$$

Время выпуска определяем по соотношению

$$T = PR / (q \cdot A) = PR \cdot s / (V \cdot \rho \cdot A) = 100 \cdot 1 / (6.3 \cdot 0.8 \cdot 0.18) = 105.2 \text{ ч.}$$

Таким образом, для случая работы ХТС в условиях неопределенности поступления сырья наблюдается существенное увеличение времени выпуска продукции.

### Вопросы для самоконтроля

**1.** Что характеризует стохастическая математическая модель дискретного процесса:

А — изменение состояния системы во времени;

Б — вероятность нахождения системы в определенном состоянии в любой момент времени;

В — длительность технологического цикла;

Г — эффективность работы стадий;

Д — частоту поступления сырья (полупродукта)?

**2.** Что характеризует модель "гибели" и "размножения":

А — вероятностное описание функционирования системы во времени;

Б — эффективность переработки сырья в конечный продукт;

В — длительность выпуска ассортимента?

**3.** Чем обусловлен стохастический характер задачи синтеза ГХП:

1 — неопределенностью выпускаемого ассортимента;

2 — стохастическим характером возмущений в системе;

3 — неравномерностью поступления сырья?

**4.** Запишите в соответствии с моделью "гибели" и "размножения" математическое описание системы, имеющей три состояния  $S_0, S_1, S_2$ , характеризующей вероятность ее нахождения в каждом из этих состояний.

5. Дать трактовку физического смысла параметров  $\lambda$  и  $\mu$  и привести соответствующие выражения для их определения.

6. Какое состояние ХТС характеризуют значения вероятностей  $P(n)$  при  $\lambda \rightarrow \lambda$ :

А — предельное;

Б — стационарное;

В — не установившееся;

Г — рабочее;

Д — установившееся?

Подписано в печать 15.03.21.  
Электронное издание.

Издательство Современного технического университета

390048, г. Рязань, ул. Новоселов, 35А.

(4912) 300630, 30 08 30