

**Е. Е. Дайчман, Е. Н. Кондратьев**  
Одесский национальный университет им. И. И. Мечникова

## **ЖЕСТКОЕ УПРАВЛЕНИЕ В ОРГАНИЗАЦИИ ЦИКЛИЧЕСКОГО РЕЖИМА РАБОТЫ ХИМИЧЕСКОГО РЕАКТОРА**

Доповідь зроблено на засіданні наукового семінару кафедри загальної та хімічної фізики та Інституту горіння та нетрадиційних технологій ОНУ 09.01.2003 р.

У даній статті запропонована ідея жорсткого управління в організації циклічного режиму роботи хімічного реактора. Для неізотермічного проточного реактора ідеального змішення з розмірними параметрами розглянут варіант управління П-образним обурюванням вхідного потоку при контролюванні максимального значення температури розігріву реактора. Побудовані динамічні характеристики циклічно загостреного реактора, досліджена залежність ефективності реактору від вибора значення управляючого параметра.

В данной статье предложена идея жесткого управления в организации циклического режима работы химического реактора. Для неизо термического проточного реактора идеального смешения рассмотрен вариант управления П-образным возмущением объемного расхода вещества на входе в реактор при контроле максимального значения температуры разогрева реактора. Построены динамические характеристики циклически обостряемого реактора, исследована зависимость эффективности реактора от выбора значений управляющего параметра.

This paper offers the idea of organization of cyclic work's regime of chemical reactor by the method of the strict operation. On an example not isothermal flowing reactor of ideal mixing the variant of control by П-figurative perturbation of entrance volumetric consumption for want of monitoring of a maximum value of temperature in reactor is realized. Dynamic characteristics of cyclically intensified reactor are designed. Dependence of efficiency of reactor on the choice of the operating parameter is studied.

**Введение.** В настоящее время все актуальнее становится проблема управления процессами в реакторах проточного действия с целью повышения тепловой мощности, увеличения производительности выхода целевых продуктов, обеспечения надежного контроля диапазонов температур и концентраций в реагирующей системе.

Переход к нестационарному режиму позволяет во многих случаях существенно повысить эффективность процесса по сравнению со стационарным. В работах [1, 2] рассматривается поведение обостренной динамической системы под воздействием синусоидальных температурных возмущений. Показано, что при определенных параметрах возмущений возможен переход в высокотемпературный режим реагирования из субкритических состояний.

Как известно, многие химические реакции идут через промежуточные стадии, в которых образуются ценные продукты, и реактор нужно удерживать в определенном состоянии с целью получения требуемых продуктов. В работе [3] для безразмерной модели неизо термического проточного реактора идеального смешения предложена идея организации циклически обостряемого режима работы реактора. Теоретически доказана возможность повышения эффективности процесса за счет работы реактора в закритической области.

Результаты анализа моделей, содержащих безразмерные параметры, полезны в теоретическом плане. Однако при моделировании конкретных процессов возникает необходимость численного анализа моделей с параметрами, имеющими вполне определенный физический смысл.

В данной работе для модели неизоэтермического проточного реактора идеального смешения с размерными параметрами в заданном диапазоне изменения температуры определяется отклик реактора как нелинейной системы на П-образное возмущение объемного расхода вещества на входе в реактор, численно рассчитываются динамические характеристики и производится оценка эффективности работы реактора в циклически обостряемом режиме.

В отличие от полуавтоматического регулирования [4] в данной работе предлагается вариант жесткого управления в организации циклического процесса. Основное отличие жесткого управления – значительные внешние возмущения, которые позволяют вывести реагирующую систему в закритическую область и, как следствие, добиться повышения производительности реактора и его мощности.

**1. Основные положения модели циклически обостряемого реактора с жестким управлением.** Математическая модель неизоэтермического проточного реактора идеального смешения, в котором протекает единственная реакция первого порядка, имеет вид: [5]

$$\frac{dC}{dt} = \frac{u}{V} (C_f - C) - ze^{-\frac{E}{RT}} C, \quad (1)$$

$$c\rho \frac{dT}{dt} = \frac{u}{V} c\rho (T_f - T) + Qze^{-\frac{E}{RT}} C - \alpha \frac{S}{V} (T - T_c) \quad (2)$$

с начальными условиями:  $t = 0, C = C_{\text{нач}}, T = T_{\text{нач}}$ ,

где  $u$  – объемный расход вещества на входе в реактор,  $C_f$  – входная концентрация реагента,  $T_f$  – входная температура смеси,  $T_c$  – температура стенок реактора.

В качестве базового набора параметров модели взяты экспериментальные данные по окислению углеводородов в реакторе идеального смешения [6].

В зависимости от значений параметров системы реализуются различные стационарные состояния. Каждому набору параметров отвечает свой тип фазового портрета, который отражает особенности динамики системы и взаимного расположения фазовых траекторий и особых точек.

Координаты стационарных состояний находятся из условий:  $dC/dt = 0, dT/dt = 0$ . В частности, для параметров системы (1), (2)  $u = 180 \text{ см}^3/\text{с}, V = 588,75 \text{ см}^3, \alpha = 8 \cdot 10^{-3} \text{ Дж}/(\text{см}^2 \cdot \text{с} \cdot \text{К}), T_f = 583 \text{ К}, C_f = 1,4 \cdot 10^{-6} \text{ моль}/\text{см}^3$  найдены три стационарных состояния. Первое стационарное состояние имеет координаты  $T_{S1} = 597 \text{ К}, C_{S1} = 1,15 \cdot 10^{-6} \text{ моль}/\text{см}^3$ , второе –  $T_{S2} = 619 \text{ К}, C_{S2} = 0,76 \cdot 10^{-6} \text{ моль}/\text{см}^3$ . Третья особая точка находится в высокотемпературной области и не представляет интереса в рамках исследования данной работы. Анализ устойчивости стационарных состояний производится по методу Ляпунова [7] путем линеаризации уравнений (1), (2) вблизи особых точек или по виду фазовых траекторий на плоскости  $(C, T)$ .

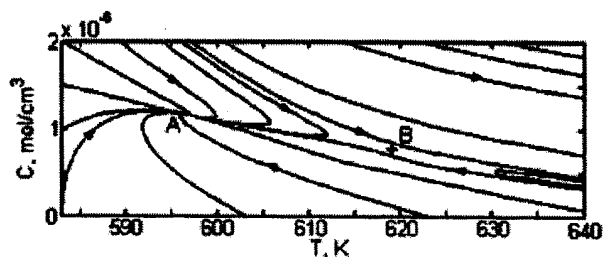


Рис.1. Фазовый портрет системы (1), (2)

Первое стационарное состояние (точка А на рис.1) относится к особенности типа устойчивый узел, второе (точка В на рис.1) – к особенности типа седло.

В данной работе используется терминология, введенная в [3]. Рабочей точкой названо состояние, которое соответствует устойчивому состоянию реактора. Фаза, соответствующая переходу реактора в состояние саморазогрева, определена как режим открытия реактора, а фаза возвращения в рабочую точку – как режим закрытия реактора.

В качестве рабочей точки уместно выбрать состояние реактора, соответствующее устойчивому узлу ( $C_{S1}$ ,  $T_{S1}$ ).

Организовать циклический процесс можно, изменяя различные параметры системы. В работе [3] рассмотрен вариант температурного управления реактором. С практической точки зрения наиболее удобно изменять объемный расход вещества на входе в реактор.

Организация жесткого цикла подразумевает наличие двух основных стадий: фазы открытия реактора и фазы его возвращения в исходную рабочую точку.

Фазу открытия реактора можно обеспечить путем уменьшения объемного расхода вещества на величину  $\Delta u$ . При этом, как видно на рис.2, происходит видоизменение фазового портрета, обусловленное сближением особых точек. Реактор стремится перейти в новое устойчивое состояние. При некотором значении  $\Delta u$  особые точки типа устойчивый узел и седло исчезают, что показано на рис.3 для значения  $\Delta u = 50 \text{ см}^3/\text{с}$ . Промежуточная ситуация, при которой происходит слияние этих особых точек, достигается при некотором значении  $\Delta u_{\text{кр}}$ . При превышении критического значения управляющего параметра в связи с исчезновением особой точки типа устойчивый узел реактор теряет устойчивость в низкотемпературной области и переходит в закритическую область.

Ограничим верхний диапазон температур работы реактора значением  $T_{\text{max}}$ . Значение  $T_{\text{max}}$  определяется технологическими требованиями. Например, для получения промежуточного продукта реакции нужно достичь определенного значения температуры, которое выше критического. Предположим, что прошло некоторое время  $t$  и температура в реакторе стала равной заданной предельной температуре  $T_{\text{max}}$ . Для каждого  $\Delta u$  существует свое время достижения максимальной температуры.

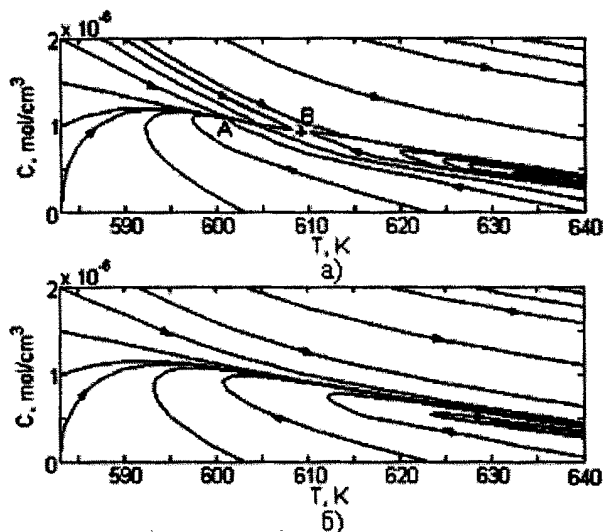


Рис.2. Изменение фазового портрета при уменьшении объемного расхода вещества на входе в реактор (а –  $\Delta u_- = 18 \text{ см}^3/\text{с}$ , б –  $\Delta u_- = 50 \text{ см}^3/\text{с}$ )

Вторую фазу можно осуществить путем увеличения объемного расхода вещества на величину  $\Delta u_+$  по сравнению с рабочей точкой. Закрыть реактор можно при условии, что значение  $\Delta u_+$  будет таким, чтобы восстановилась качественная картина фазового портрета. При этом реактор попадает в окрестность вновь появившегося седла на траекторию, ведущую к устойчивому узлу, находящемуся в малой окрестности исходной рабочей точки. Условием завершения фазы закрытия реактора является достижение температуры исходной рабочей точки.

Периодически повторяя этот процесс, открывая и закрывая реактор, можно организовать циклический режим его работы, оставаясь в заданных температурных границах технологического процесса.

Используя нелинейность теплового отклика системы на внешнее воздействие, можно ожидать, что количество тепла в цикле будет выделяться больше по сравнению с рабочей точкой. Для оценки эффективности циклически обостряемого режима реактора, как и в работе [3], используется определение тепловой производительности работы реактора:

$$\eta = \frac{N - N_S}{N_S}, \quad (3)$$

где  $N$  – средняя мощность циклически обостряемого реактора,  $N_S$  – средняя мощность, которая бы выделилась за то же время, если бы реактор работал в режиме рабочей точки.

$$N = \frac{1}{\tau} \int_0^{\tau} Q z e^{-\frac{E}{RT}} C V dt, \quad (4)$$

где  $\tau$  – период одного цикла реактора.

2. Динамические характеристики циклически обостряемого реактора. Результаты сравнения стационарного режима и циклически обостряемого представлены на рис.3. Кривые 1 соответствуют установившемуся стационарному режиму (рабочей точке), кривые 2 – изменению температуры и концентрации со временем для циклически обостряемого реактора.

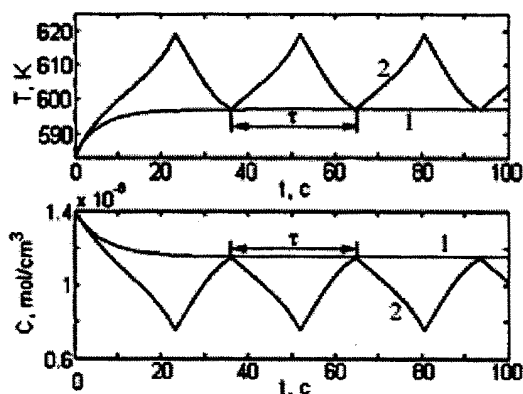


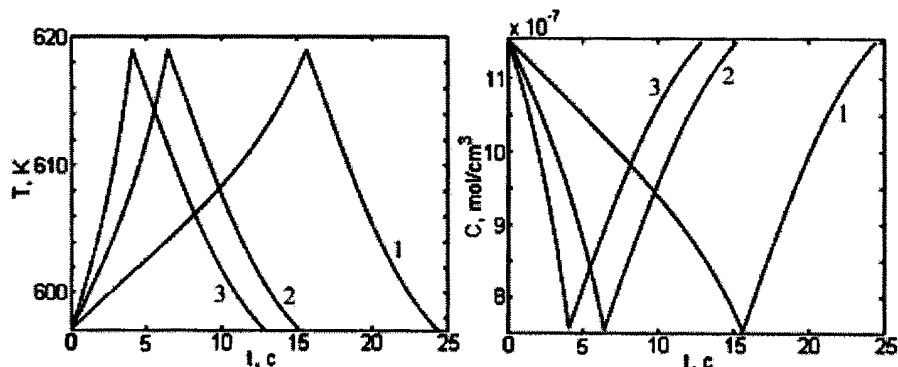
Рис.3. Динамические кривые температуры и концентрации для циклически обостряемого реактора и реактора, работающего в режиме рабочей точки

Полный период установившегося режима реактора определяется суммой времени отклика реактора на возмущение  $\Delta u_-$  и времени его релаксации в исходное по температуре состояние под воздействием увеличения объемного расхода вещества на величину  $\Delta u_+$ . Поэтому интересно проследить, как меняются эти составляющие периода в зависимости от величины возмущений  $\Delta u_-$  и  $\Delta u_+$ .

На рис.4 представлены результаты расчетов зависимостей  $T(t)$  и  $C(t)$  для одного цикла реактора при вариации открывающего реактор параметра  $\Delta u_-$ . Здесь, как и ранее, условием переключения реактора является достижение заранее определенного значения максимальной температуры или температуры рабочей точки.

Кривым 1 соответствует значение  $\Delta u_- = 50 \text{ см}^3/\text{с}$ , 2 –  $\Delta u_- = 100 \text{ см}^3/\text{с}$ , 3 –  $\Delta u_- = 150 \text{ см}^3/\text{с}$ . При этом для всех кривых задано значение закрывающего реактор параметра  $\Delta u_+ = 100 \text{ см}^3/\text{с}$ .

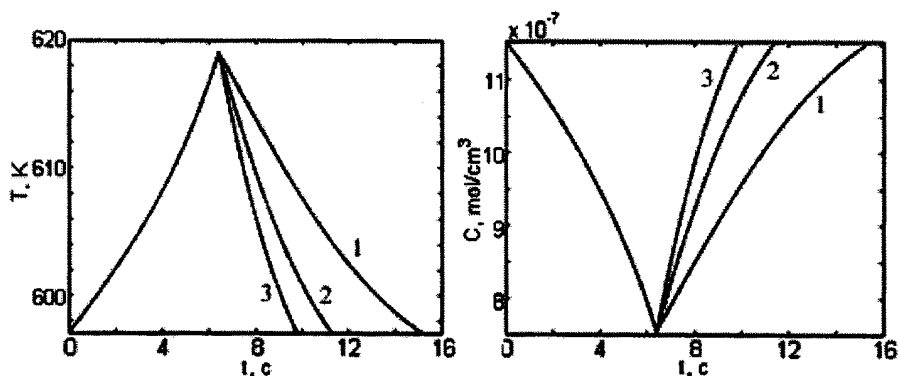
Видно, что при увеличении значения  $\Delta u_-$  время разогрева реактора сокращается. Наиболее быстрому разогреву соответствует случай замкнутого реактора, для которого объемный расход вещества на входе в реактор равен нулю. В то же время период индукции имеет ограничение сверху, как это отмечалось в [3], так как даже при  $T_{\text{max}} \rightarrow \infty$  длительность фазы разгонки реактора не больше времени самоиндукции адиабатического реактора [5].

Рис.4. Зависимость  $T(t)$  и  $C(t)$  при изменении  $\Delta u_+$ .

Влияние гасящего параметра  $\Delta u_+$  на вторую составляющую периода (время релаксации) прослежено численным расчетом при остальных фиксированных параметрах задачи. Результаты расчетов представлены на рис.5.

Кривым 1 соответствует значение  $\Delta u_+ = 50 \text{ см}^3/\text{с}$ , 2 –  $\Delta u_+ = 100 \text{ см}^3/\text{с}$ , 3 –  $\Delta u_+ = 150 \text{ см}^3/\text{с}$  при значении открывающего реактор параметра  $\Delta u_- = 100 \text{ см}^3/\text{с}$ .

При увеличении значения  $\Delta u_+$  время охлаждения реактора уменьшается и в принципе может быть сколь угодно малым (при малых  $T_{\text{max}}$  и больших  $\Delta u_+$ ). Таким образом, возможна организация сверхбыстрого охлаждения циклически обостряемого реактора. Этот факт существенен при разработке ПВО-нормативов эксплуатации циклически обостряемого реактора. Определение верхней границы времени релаксации представляет отдельный интерес с точки зрения улучшения энергетических показателей такого реактора. Из результатов теоретического исследования [3] следует жесткое требование на ограничение максимального значения температуры реактора, но при этом нет верхней границы на значение второй составляющей периода. Следовательно, возможно вырождение циклического режима за счет бесконечно протяженной во времени фазы релаксации.

Рис.5. Зависимость  $T(t)$  и  $C(t)$  при изменении  $\Delta u_+$ .

3. Эффективность циклически обостряемого реактора. Производительность реактора рассчитывается для установившегося режима колебаний концентрации и температуры по формуле (4). В частности, для амплитудного значения скорости открытия реактора  $\Delta u_- = 100 \text{ см}^3/\text{с}$  и амплитудного значения скорости закрытия реактора  $\Delta u_+ = 100 \text{ см}^3/\text{с}$  рассчитанное значение эффективности оказалось приблизительно равным 1,57.

Столь высокая эффективность связана с тем, что при жестком управлении реактор часть времени находится в закритической области. Из выражения (4) следует, что ее значение зависит не только от величин концентрации и температуры, но и от времен длительности каждой фазы цикла. Последние в свою очередь, как показывает анализ, существенно меняются в зависимости от значений параметров  $\Delta u_-$  и  $\Delta u_+$ . Поэтому интересно проследить, каким образом значение эффективности зависит от каждого фактора в отдельности. На рис.6 представлены результаты расчетов для определенных соотношений  $\Delta u_-$  и  $\Delta u_+$ .

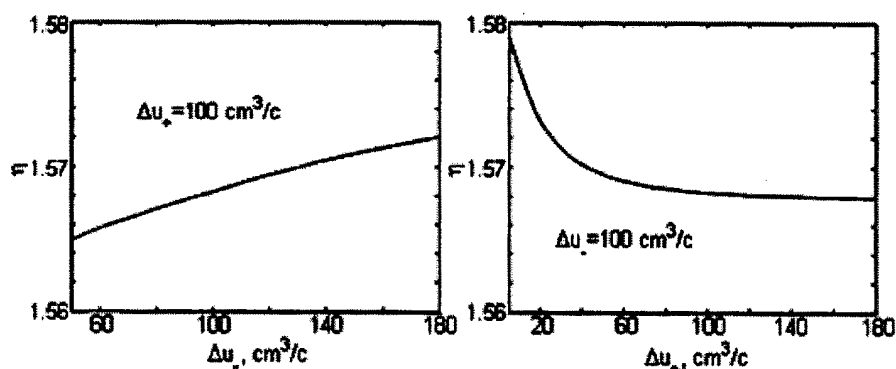


Рис.6. Зависимость тепловой производительности от вариации параметров  $\Delta u_-$  и  $\Delta u_+$

Видно, что с увеличением  $\Delta u_-$ , т.е. с уменьшением объемного расхода вещества на фазе открытия реактора, производительность растет. Следовательно, для более эффективной работы реактора нужно первую фазу организовать так, чтобы  $\Delta u_-$  было максимально возможным. Максимальному значению эффективности соответствует состояние замкнутого реактора. Рост производительности здесь физически можно объяснить так. Чем быстрее выходит реактор в высокотемпературную область, тем больше вклад в производительность за счет фазы релаксации, так как время существования в высокотемпературном режиме больше времени в низкотемпературной области.

Из зависимости  $\eta(\Delta u_+)$  видно, что с увеличением  $\Delta u_+$ , т.е. с увеличением объемного расхода вещества на стадии закрытия реактора, производительность падает. Поэтому для повышения эффективности следует фазу закрытия реактора организовать так, чтобы закрывающее реактор увеличение объемного расхода вещества было минимальным.

**Заключение.** Таким образом, численным путем показана возможность организации циклически обостряемого режима работы реактора методом жесткого регулирования, в котором управляющим параметром является объемный расход вещества на входе в реактор.

В отличие от мягкого полуавтоматического регулирования, рассчитанное при жестком управлении значение эффективности циклически обостряемого реактора оказывается достаточно высоким. Такой результат является следствием того, что реактор значительную часть времени находится в закритической области.

1. Korobko A.V., Kondratyev E.N. A conversation degree of particle reacting heterogeneously in dynamic conditions // Conference-Proceeding 16<sup>th</sup> International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems.– 1999.– P. 198–201.
2. Коробко А.В., Кондратьев Е.Н. Температурная динамика одиночных реагирующих частиц под периодическим температурным возмущением и шумом // Международная школа-семинар «Горение дисперсных систем». – Одесса (Украина), 2001.– С. 65–68.
3. Дайчман Е.Е., Кондратьев Е.Н. Модель циклически обостряемого реактора // Вісник Одеськ. держ. ун-ту. – 2001. – Т. 6, вип. 3. – Фіз.-мат. науки. – С. 154–160.
4. Дайчман Е.Е., Кондратьев Е.Н. Полуавтоматическое регулирование в организации замкнутых циклов проточных реакторов // Тез. докл. 20-й конф. стран СНГ «Дисперсные системы».– Одесса, 2002.– С. 88–89.
5. Франк-Каменецкий Д.А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике.– М.: Наука, 1967.– 491 с.
6. Быков В.И., Цыбенова С.Б. Параметрический анализ моделей реакторов идеального смешения и вытеснения // Физика горения и взрыва.– 2001.– Т. 37, № 6.– С.22–29.
7. Эрроусмит Д., Плейс К. Обыкновенные дифференциальные уравнения. Качественная теория с приложениями.– М.: Мир, 1986.– 243 с.

Получено 19.02.2003 г.