

УДК:004.94/66.02

ИМИТАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКОГО РЕАКТОРА ТРУБЧАТОГО ТИПА

С.П. Бобков, Р.Г. Астраханцев, Е.А. Павлова (Иваново),
И.А. Астраханцева (Иваново, Москва)

Введение

В настоящее время получило широкое распространение использование дискретных подходов при исследовании самых разнообразных процессов и явлений. В частности, агентные модели широко используются при изучении экономических, социальных, биологических и других проблем. Не стали исключением и технические науки, где достаточно успешно применяется разновидность агентного подхода – модели в виде систем клеточных автоматов. Этому способствуют несколько причин. В первую очередь применение дискретных методов стимулируется повсеместным использованием компьютерных технологий, требующих цифрового представления данных. Однако, на наш взгляд, существенное влияние здесь оказывают и методологические основания.

Классические инструменты математического исследования базируются на идее бесконечно малых величин, что делает постановку задачи континуальной. Безусловно, уравнения, лежащие в основе фундаментальных теорий, привнесли неоценимый вклад в развитие мировой науки. Но этот же научный прогресс дал многочисленные свидетельства квантового характера мироздания. В реальной жизни человек изучает объекты, параметры которых конечны. Математическая абстракция в виде, бесконечно малых постепенно вытесняется концепцией физически малых, но конечных величин.

В этой связи представляет интерес предложенная московским профессором В.П. Майковым более 30 лет назад парадигма, определяющая макроскопическое дискретное представление о природе вещества [1]. Эта модель исследования как бы проводит грань между микромиром, в котором справедливы законы квантовой механики и эмпирическим миром, где имеют смысл привычные макроскопические характеристики – температура, давление, вязкость и пр. Здесь вводится понятие макроячейки, которая, по мнению автора, является совокупностью микрочастиц в количестве не менее 10^{10} штук. Данная концепция позволила внести большой вклад как в развитие системного подхода, так и в теорию и практику химической технологии. С этих позиций использование дискретных моделей при описании целого ряда технологических процессов может считаться весьма перспективным.

В свою очередь, возросшие возможности компьютерных средств, позволили более активно использовать методы имитационного моделирования. Они предполагают имитацию поведения реального объекта (прототипа) на компьютере, используя специально созданную моделирующую программу. Алгоритм имитации в максимальной степени сохраняет характерные поведенческие свойства реального объекта и последовательность происходящих в нем событий. Имитационное моделирование позволяет проводить численные эксперименты и, тем самым, получать необходимую информацию о функционировании объекта.

Описание предметной области

В промышленном производстве часто используются технологические аппараты трубчатого типа – различные колонны, массообменное, теплообменное, реакторное оборудование. Характерной особенностью таких конструкций является существенное превышение их длины по отношению к диаметру. Поскольку эффективность

производственных аппаратов в значительной степени определяется структурой потоков в них, корректное описание процесса движения сплошной фазы в рабочих зонах оборудования представляется весьма важным [2]. При этом математические модели динамики движения вещества в аппарате должны, с одной стороны, позволять определять параметры потока с достаточной точностью, а с другой – иметь не слишком сложную математическую форму и быть удобными для использования в расчетах.

Этим требованиям в значительной мере удовлетворяет дискретный стохастический подход. В соответствии с ним рассматривается эволюция системы конечных пространственных макроячеек, которые по сути являются клеточными автоматами и функционируют по шагам дискретного времени. Подход также дает возможность учитывать влияние случайных факторов на ход исследуемого процесса.

Использованный подход основан на принципе, который утверждает, что эволюция системы формируется поведением элементов, составляющих систему. При этом отдельные элементы функционируют, подчиняясь одинаковым правилам поведения [3]. Эти правила могут иметь как вероятностный характер, так и быть детерминированными. Состояние и локализация элементов алгоритмически закодированы в компьютерной программе.

В качестве объекта исследования был выбран трубчатый реактор для генерации озона [4]. Принцип работы аппарата следующий. Газовая смесь, содержащая кислород, подается в цилиндрическую реакционную зону, где расположены электроды и обрабатывается там низкотемпературной плазмой. В результате смесь обогащается озоном, который синтезируется под действием электрического разряда и покидает аппарат. Одновременно с синтезом озона в аппарате протекают обратные реакции, в результате которых озон разлагается. Таким образом, модель должна имитировать три основных процесса, одновременно протекающих в реакторе:

1. Движение газовой смеси;
2. Синтез озона;
3. Частичная деструкция озона;

Методика получения модели

При получении дискретной модели аппарата использовались следующие гипотезы [5].

Сплошная среда в аппарате рассматривалась, как система макроячеек, размер которых достаточен для реализации термодинамических параметров движущегося вещества (давление, температура, плотность, вязкость и т.п.).

Макроячейки могут двигаться только в направлениях, установленных воображаемой пространственной решеткой. Схема двумерной модели с регулярной ортогональной решеткой приведена на рис.1. Квантование пространства с постоянным шагом Δh позволяет перейти от физических размеров в координатах x_1, x_2 к дискретным, с координатами i, j .

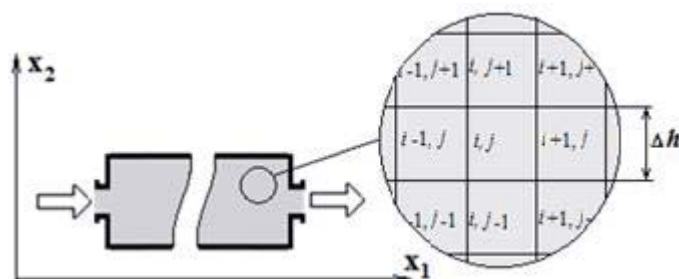


Рис.1. Схема двумерной модели аппарата

Макрочайки сплошной фазы могут находиться только в двух состояниях – активном и неактивном. В соответствии с дискретным характером модели допускается, что в активном состоянии в ячейке содержится достаточное в макроскопическом смысле количество озона, которого нет в неактивном состоянии. Процесс моделирования работы аппарата состоит в том, что на каждом шаге по времени происходит обновление массива состояния макрочеек вследствие их перемещения и изменения активности. Имитация данных процессов определяется правилами, описанными ниже. Блок-схема алгоритма моделирования представлена на рис. 2.

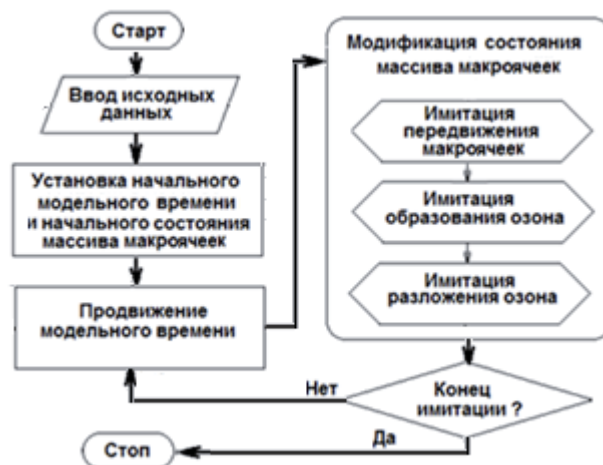


Рис.2. Укрупненная блок-схема алгоритма моделирования

Имитация перемещения макрочеек

Разработанная модель предполагает, что движение макрочеек в аппарате происходит под действием двух механизмов – детерминированного и вероятностного.

Первый механизм обусловлен перепадом давления газовой смеси на входе в аппарат и является плоскопараллельным движением в направлении оси течения. Для определения модуля скорости в осевом направлении используется выражение, вытекающее из закона Пуазейля:

$$v = \frac{\Delta P(R^2 - r^2)}{4\mu L}, \quad (1)$$

где v – скорость, как функция расстояния до оси аппарата;

ΔP – перепад давления;

R – внутренний радиус аппарата;

r – расстояние до оси аппарата; μ – вязкость среды;

L – длина рабочей зоны аппарата.

Все входящие в выражение (1) параметры являются физическими и размерными.

Определение детерминированной составляющей скорости движения макрочеек происходит так. Для очередной макрочайки по уравнению (1) вычисляется модуль осевой скорости, который затем квантуется с учетом шага решетки Δh . Полученная величина позволяет найти предварительные координаты нового положения макрочайки

В качестве второго механизма, определяющего перемещение макрочеек, рассматривается стохастический процесс перемешивания частиц потока, обусловленный флуктуациями скорости. Принимается, что макрочайка может совершить случайный переход в одно из ближайших возможных положений. В данной работе рассматриваются выбор одного из четырех соседних положений на решетке

(окрестность фон Неймана). При таком выборе применялся оператор «выбора по жребии»:

$$m(i, j) \rightarrow \begin{cases} m(i, j+1) & \text{если } 0 < \xi \leq d_1 \\ m(i+1, j) & \text{если } d_1 < \xi \leq d_1 + d_2 \\ m(i, j-1) & \text{если } d_1 + d_2 < \xi \leq d_1 + d_2 + d_3 \\ m(i-1, j) & \text{если } d_1 + d_2 + d_3 < \xi \leq 1 \end{cases} \quad (2)$$

где $m(i, j)$ – дискретные координаты макроячейки m ;

ξ – случайное число, равномерно распределенное в диапазоне $[0 \div 1]$;

d_k – вероятности движения в соответствующем направлении.

Окончательное положение макроячейки корректируется с учетом оператора (2). В общем случае все вероятности направления случайного перемещения принимались одинаковыми

Имитация образования озона

Опустив подробности химического характера, примем, что синтез озона в аппарате происходит следующим образом.

Неактивная макроячейка, двигаясь внутри аппарата, под действием электрического разряда может перейти в активное состояние с вероятностью C_1 . Этот показатель можно интерпретировать, как отношение количества активных ячеек, появившихся на данном временном шаге к общему количеству макроячеек. Вероятность C_1 зависит от состава сплошной среды, параметров разряда, и конструктивных особенностей Аппарата. В то же время C_1 не зависит от времени пребывания макроячеек в рабочей зоне, т.е. от расхода газа через аппарат.

Предварительная оценка данного показателя проводилась, исходя из данных по скоростям химических реакций образования озона [6] и размеров макроячейки. Затем полученные значения уточнялись на основе экспериментальных данных. В результате скорректированная вероятность C_1 лежала в диапазоне значений $(2 \cdot 10^{-3} \div 0,5 \cdot 10^{-3})$.

Алгоритм моделирования процесса образования активных макроячеек на каждом шаге по времени включает следующие этапы:

1. Исходя из заданного значения вероятности возникновения активного элемента и размеров решетки, вычисляется среднее количество активных макроячеек, появляющихся на каждом шаге по времени $n_{\text{ср}}$:

$$n_{\text{ср}} = C_1 \cdot N \cdot M, \quad (3)$$

где N и M – количество узлов используемой решетки в направлении соответствующих осей.

2. Определяется конкретное количество появившихся на данном шаге активных макроячеек n_k . Оно генерируется как целая случайная величина, равномерно распределенная от 1 до $2 n_{\text{ср}}$.

3. Координаты (положение на решетке) каждого нового активного элемента конкретизируются путем случайного выбора свободного узла решетки.

Имитация разложения озона

Было принято, что активная макроячейка на каждом шаге по времени может вернуться в пассивное состояние с вероятностью C_2 . Данная вероятность зависит от состава среды и конструкции реактора. Кроме того, вероятность деструкции C_2 увеличивается с ростом продолжительности «жизни» активной макроячейки.

В процессе моделирования вероятность C_2 рассматривалась как случайная величина с экспоненциальным распределением, возрастающая с увеличением продолжительности срока существования активной макроячейки:

$$C_2(\tau) = 1 - e^{-\lambda\tau} \quad (4)$$

где τ – продолжительность существования активной макроячейки;

λ – параметр, связанный с количеством событий разложения макроячеек за шаг времени.

Значение базового параметра экспоненциального распределения λ , который связан процессом «гибели», оценивалось так.

Если обозначить среднее число активных макроячеек, переходящих в исходное состояние на каждом шаге по времени, как $m_{\text{ср}}$, то можно записать:

$$\lambda = 1/m_{\text{ср}}. \quad (5)$$

Величина $m_{\text{ср}}$ должна коррелировать с показателем скорости появления активных ячеек $n_{\text{ср}}$. С учетом сравнения кинетических параметров реакций образования и разрушения озона [6], значение $m_{\text{ср}}$, определялось, как непрерывная случайная величина, равномерно распределенная от 1 до $n_{\text{ср}}$. В проведенных имитационных экспериментах вероятность C_2 на каждом шаге составляла $(0,2 \div 0,9)$ в зависимости от продолжительности «жизни».

Алгоритм моделирования перехода активных элементов системы в исходное состояние на каждом шаге по времени следующий:

1. Выбор очередной активной макроячейки и расчет вероятности ее дезактивации C_2 по выражениям (4) и (5).

2. Имитация события. При этом генерируется случайное число ξ , равномерно распределенное в диапазоне $[0 \div 1]$. Если выполняется условие $\xi < C_2$, то считается, что событие произошло.

Таким образом, компьютерная имитация процесса в трубчатом реакторе состоит из следующих этапов:

1. ввод исходных данных: размеры рабочей зоны реактора; перепад давления газовой смеси на входе в реактор; параметры среды; шаги дискретизации времени и пространства; общее число шагов моделирования; необходимы вероятностные параметры;

2. установка начального значения дискретного времени и начального состояния массива макроячеек;

3. продвижение имитационного времени на один шаг;

4. имитация процессов в рабочей зоне реактора согласно методикам, описанным выше: перемещение макроячеек, образование активных макроячеек, «гибель» активных макроячеек; к концу данного этапа формируется массив состояния элементов на данном шаге по времени;

5. если шаги имитационного времени не исчерпаны, то происходит возврат к этапу 3;

6. вывод и визуализация результатов.

Полученная последовательность массивов состояния макроячеек подвергалась статистическому анализу и служила основой для создания графических иллюстраций моделируемого явления.

Описанный алгоритм был реализован в программной среде MatLab.

Результаты имитационного моделирования

Физическим объектом при имитационном моделировании являлся лабораторный реактор трубчатого типа, в котором генерировался озон под действием диэлектрического барьерного разряда. Прототип имел длину активной зоны 120 мм и внутренний радиус 7,5 мм. Разряд создавался током промышленной частоты и напряжением до 20 кВ. Исходная газовая смесь, содержала технический кислород и имела динамическую вязкость $20,1 \cdot 10^{-6}$ Па·с. Расход сплошной среды регулировался,

что позволяло менять ее среднюю скорость в пределах $(0,01 \div 0,04)$ м/с и, соответственно, продолжительность контакта смеси с зоной разряда.

При дискретизации пространства в имитационной модели был выбран шаг $\Delta x = 0,1$ мм, время квантовалось с шагом $\tau = 0,02$ с. В процессе имитационного моделирования определялись несколько реализаций изучаемого случайного процесса, далее полученные данные подвергались статистической обработке.

Некоторые результаты вычислительных экспериментов представлены ниже.

Результаты компьютерной имитации процесса образования активных макроячеек представлены на рис.3. По оси абсцисс в данном и двух последующих рисунках, отложено модельное время. По оси ординат – количество появившихся активных макроячеек.

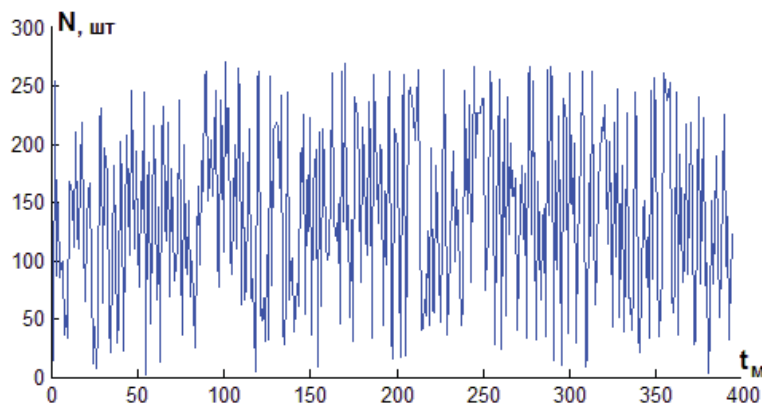


Рис. 3. Образование активных макроячеек

Результаты, представленные на рис. 3 получены при вероятности образования C_1 , равной $1,5 \cdot 10^{-3}$. Модельное время 400 тактов, что соответствует восьми секундам реального времени. Результаты ряда проведенных показываю, что в течение одного шага по времени в системе может появляться до 300 активных ячеек. Среднее количество активных элементов, возникающих на каждом шаге по времени – 135 шт.

Итоги имитации процесса разложения озона, т.е. возврата активных элементов макроячеек в неактивное состояние показаны на рис. 4. Здесь по оси ординат приведено количество активных макроячеек, возвратившихся в исходное состояние на каждом шаге модельного времени.

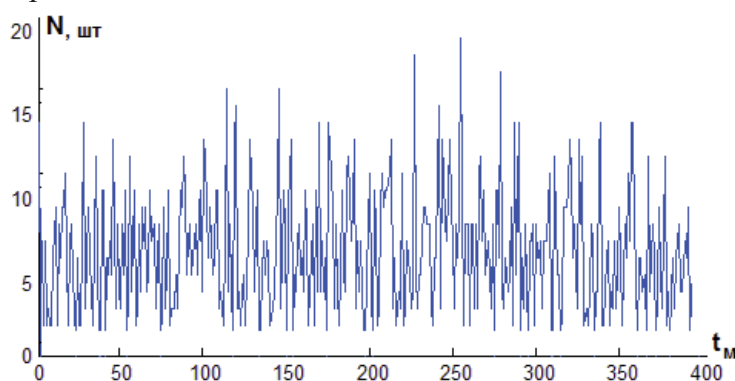


Рис. 4. Деструкция активных макроячеек.

Представленные данные показывают, что в исследуемой системе за один шаг дискретного времени перестают быть активными, в среднем 12 ячеек.

Количество активных макроячеек, выходящих из реактора, т.е. результат работы реактора, изображено на рис. 5 (по оси ординат). Процесс имитировался от момента запуска.

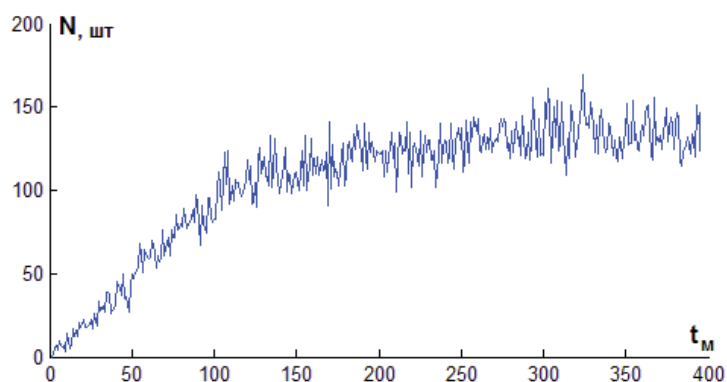


Рис. 5. Выход активных макроэлементов из реактора

Анализ данных на рис.5 показывает, что по мере возрастания времени с момента запуска, режим работы аппарата приближается к стационарному, что характерно для подобного оборудования.

Была проверена адекватность предлагаемого имитационного алгоритма. Для этого проведено сравнение результатов, полученных при компьютерном моделировании с данными реального эксперимента. Таблица дает возможность сопоставить модельные и экспериментальные значения концентрации озона на выходе из реактора аналогичных размеров при разных скоростях движения газовой смеси.

Таблица. Сравнение экспериментальных и модельных данных

Скорость газа, (м/с)	Время контакта (с)	Концентрация озона $\cdot 10^{16}$ (1/см ³)		Погрешность, %
		Эксп.	Мод.	
0,01	12	9,5	9,1	4,2
0,018	6,7	6,1	6,4	3,2
0,04	3	3,6	3,1	13,8

Анализ таблицы показывает, что относительная погрешность результатов не превышает 15%. Следовательно, предлагаемая дискретная модель трубчатого реактора вполне адекватна в первом приближении.

Заключение и выводы

Следует отметить, что результаты, полученные с использованием дискретного статистического подхода, не противоречат существующим теоретическим взглядам на изучаемый процесс. Это касается и дискретного описания течения сплошной среды, и стохастических приемов имитации химической реакции.

Анализируя дискретное описание структуры потоков, есть смысл сравнить предлагаемую модель с другими широко известными подходами, которые базируются на принципах идеального вытеснения и диффузионного перемешивания [7]. Указанные модели сводят режим течения в аппарате фактически к поршневому. В то же время в предлагаемом подходе использован классический закон гидродинамики (1), определяющий уменьшение осевой скорости потока по мере приближения к стенкам. Это делает описание более достоверным. Что касается локального перемешивания, то вместо применения аналогов первого закона Фика для молекулярной диффузии здесь непосредственно использован статистический подход, который широко применяют в физике для описания движения частиц [8].

Рассматривая правомерность использования вероятностных приемов для дискретного моделирования реакции синтеза озона, следует отметить, что стохастические подходы широко используются в химической кинетике, в частности, при описании взаимодействия молекул. При этом уравнения для скоростей химических реакции выводятся из положений теории вероятности и молекулярно-кинетической теории. Поэтому можно считать, что использование обобщенных вероятностей образования и деструкции озона не противоречит статистическим аспектам оценки скоростей реакций [9].

Кроме прочего, достоинством предлагаемого подхода можно считать возможность исследования распределения макроячеек непосредственно в рабочей зоне аппарата, а не только в выходном потоке, что присуще большинству классических моделей.

Также необходимо отметить, что дискретные модели по своей архитектуре чрезвычайно удобны для реализации, особенно при использовании технологии параллельных вычислений.

В качестве главного недостатка предлагаемого подхода следует отметить трудности, возникающие при определении числовых значений вероятностных показателей. Помимо использования статистики реальных экспериментов, выходом из ситуации здесь может служить применение базовых положений статистической термодинамики.

Указанное выше позволяет сделать вывод, что предлагаемый подход к имитационному моделированию можно успешно использовать при совершенствовании конструкций трубчатых реакторов и оптимизации режимов их работы. Сказанное касается и других видов технологического оборудования. С другой стороны, физическая ясность и простота исходных положений, доступность компьютерной реализации и возможность эффективной визуализации результатов позволяют рекомендовать дискретные стохастические модели к использованию в педагогической практике учреждений высшего и среднего специального образования. В современных условиях широкого внедрения цифровых технологий в учебную деятельность это становится особенно актуальным.

Литература

1. **Майков В.П.** Расширенная версия классической термодинамики. Физика дискретного пространства-времени. М.: МГУИЭ; 1997. 160 с.
2. **Кутепов А.М., Бондарева Т.И., Беренгартен М.Г.** Общая химическая технология. М.: Ленанд, 2022. 512 с.
3. **Малмыгин Г.А., Ершов Н.М.** Моделирование химических реакций с использованием клеточных автоматов // Электронный журнал «Системный анализ в науке и образовании». 2023. Том 3. С. 1-12.
4. **Bobkov, S. P.** The use of multi-agent systems for modeling technological processes / S. P. Bobkov, I. A. Astrakhantseva // Journal of Physics: Conference Series : 2, Moscow, 01 июля 2021 года. – Moscow, 2021. – P. 012002. DOI 10.1088/1742-6596/2001/1/012002. – EDN ZXPPKV.
5. **Бобков С.П., Астраханцева И.А.** Особенности использования систем клеточных автоматов при моделировании основных процессов переноса // «Современные наукоемкие технологии. Региональное приложение». – 2023. – № 2(74). – С. 49-59. DOI: 10.6060/snt.20237402.0005.
6. **L. Saidiaa.** Исследование физико-химических свойств импульсного разряда в смеси CO₂ - O₂ / L. Saidiaa, A. Belasria, [и др.] // Физика плазмы, 2019, т. 45, № 5, с. 465–480.

7. **Гумеров А.М.** Математическое моделирование химико-технологических процессов. СПб.: Лань, 2022. 176 с.
8. **Рудобашта С.П.** Химическая технология: диффузионные процессы. В 2 ч. Часть 1: учебное пособие для вузов / С. П. Рудобашта, Э. М. Карташов. - 3-е изд., перераб. и доп. - Москва: Юрайт, 2024. - 262 с.
9. **Астраханцева И.А.** Дискретная стохастическая модель гидродинамики потока / И.А. Астраханцева, С.П. Бобков // Моделирование систем и процессов. 2023. Т. 16. № 2. С. 7-14. DOI 10.12737/2219-0767-2023-16-2-7-14. – EDN BYGGKR.