

*Д.Г. Брыксин, С.В. Куртаков\**

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА МЕТАНОЛИЗА В РЕАКТОРЕ ВИХРЕВОГО ТИПА

Целью данной работы является разработка компьютерной модели процесса синтеза биодизельного топлива по реакции метанолиза растительных масел в присутствии щелочного катализатора в аппарате с вихревым слоем ферромагнитных частиц.

Математическое описание процесса синтеза биотоплива в аппарате вихревого слоя представляет собой систему дифференциальных уравнений гидродинамических, электромагнитных и химических процессов, осуществляемых в объеме аппарата вихревого слоя [1].

При выводе уравнений математической модели были приняты следующие допущения:

1) по обмоткам проходит равный по значениям амплитуд и сдвинутый на четверть периода ( $90^\circ$ ) синусоидальный ток, который возбуждает в обмотках индуктора переменное электромагнитное поле;

2) реакционная смесь представляет собой единую непрерывную фазу, электромагнитные свойства которой определяются свойствами ферромагнитных частиц;

3) вязкостно-плотностные характеристики реакционной смеси определяются исходя из аддитивности свойств исходных реагентов и характеризуются несжимаемостью потока [2].

В результате были получены следующие уравнения.

Уравнение движения реакционной смеси в аппарате вихревого слоя ферромагнитных частиц (уравнение Навье – Стокса в векторной форме):

$$\frac{dv}{dt} = F - \frac{1}{\rho} \text{grad}(p) + \nu \Delta v,$$

где  $\Delta$  – оператор Лапласа;  $\nu$  – кинематическая вязкость смеси,  $\text{м}^2/\text{с}$ ;  $v$  – скорость потока реакционной смеси,  $\text{м}/\text{с}$ ;

Уравнение электромагнитодинамики аппарата вихревого слоя (уравнение Ампера – Максвелла):

$$\text{rot}H = j + \frac{\partial D}{\partial t},$$

где  $H$  – напряженность магнитного поля;  $D$  – электрическое смещение;  $j$  – плотность тока;

---

\* Работа выполнена под руководством канд. техн. наук, доцента ФГБОУ ВПО «ТГТУ» Д.С. Дворецкого.

Система обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающих кинетику элементарных химических реакций:

$$\left\{ \begin{array}{l} d[C_{\text{спирт}}]/dt = -v_0; \\ d[C_{\text{МеОН}}]/dt = -v_0 + v_1 + v_3 + v_5; \\ d[C_{\text{алкоголят}}]/dt = v_0 - v_1 - v_3 - v_5; \\ d[C_{\text{ТАГ}}]/dt = -v_1 + v_2; \\ d[C_{\text{ДАГ}}]/dt = v_1 - v_2 - v_3 + v_4; \\ d[C_{\text{МАГ}}]/dt = v_3 - v_4 - v_5 + v_6; \\ d[C_{\text{глицерин}}]/dt = v_5 - v_6; \\ d[C_{\text{МЭ}}]/dt = v_1 - v_2 + v_3 - v_4 + v_5 - v_6, \end{array} \right.$$

где  $v_1 \dots v_6$  – скорости реакций.

Граничные условия для уравнения Навье – Стокса:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial v_x}{\partial t} = \frac{\partial v_y}{\partial t} = 0; \\ p = 0, \end{array} \right.$$

где  $p$  – число пар полюсов.

Для уравнения Ампера – Максвелла устанавливаются в виде условия Неймана и имеют следующий вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} H_t = D_n = \varepsilon; \\ j_n = j, \end{array} \right.$$

где  $H_t$  – тангенциальная компонента напряженности магнитного поля, равная линейной плотности поверхностного тока ( $\varepsilon$ );  $D_n$  – нормальная компонента электрического смещения;  $j_n$  – нормальная компонента плотности тока.

Начальные условия для уравнения химической кинетики:

$$\begin{cases} C_0 = C_{0H} - C_{2H}; \\ C_1 = C_4 = C_5 = C_6 = C_7 = 0; \\ C_2 = C_{2H}; \\ C_3 = C_{3H}. \end{cases}$$

Для уравнения Навье – Стокса

$$\begin{cases} v_x = v_y = 0; \\ p = 0. \end{cases}$$

Для уравнения Ампера – Максвелла:  $A = 0$ .

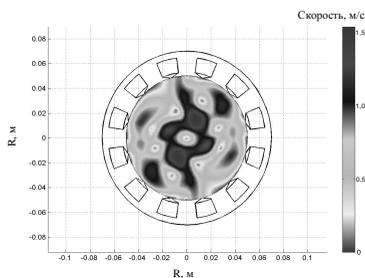
Решение уравнений математической модели осуществлено методом конечных элементов в программной среде Matlab. Исходные параметры процесса: частота тока – 50 Гц; сила тока – 5 А; величина магнитной индукции – 0,12 Тл; количество ферромагнитных частиц в реакционной смеси – 0,03 % об.; отношение  $l/d$  ферромагнитных частиц – 10; начальная концентрация метанола – 7 моль/л; начальная концентрация алкоголята калия – 0,2 моль/л; начальная концентрация масла – 0,8 моль/л; температура – 60 °С.

Результаты расчета иллюстрируют рис. 1 – 6. Анализ полученных результатов показывает, что в ходе процесса метанолиза происходит образование турбулизованных потоков реакционной смеси (рис. 1), формирование которых обусловлено возникновением вихревых электромагнитных полей (рис. 2). Одновременно с этим происходит перераспределение поверхностных и связанных зарядов, что приводит к изменению дисперсного состава эмульсии (рис. 3). Интенсивное перемешивание реакционной смеси порождает формирование зон с интенсивной массоотдачей внутри реакционного объема (рис. 4).

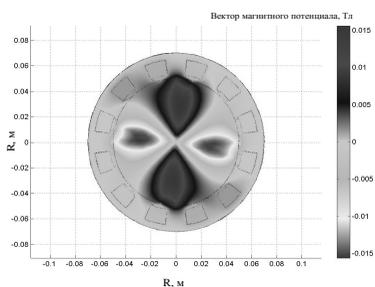
Данные по кинетике процесса метанолиза растительных масел в присутствии щелочного катализатора были получены путем интегрирования по расчетной области реакционного объема каждой из концентрационных переменных. Результаты расчета в виде кинетических кривых представлены на рис. 5 – 6.

Анализ кинетической кривой образования метиловых эфиров (рис. 5) показывает, что основная масса метиловых эфиров синтезируется в течение 1,5 – 2 секунд.

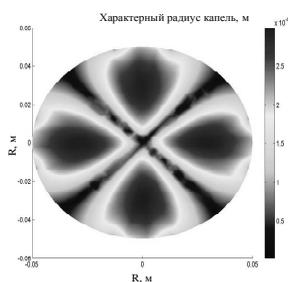
Проверка адекватности разработанной математической модели была проведена по экспериментальным данным, полученным с использованием лабораторного аппарата с вихревым слоем ферромагнитных частиц, при этом максимальное рассогласование расчетных по модели и экспериментальных данных не превышало 10 %.



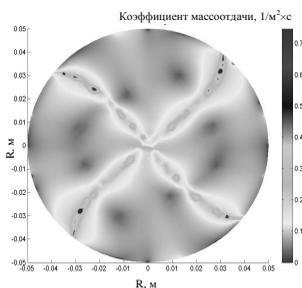
**Рис. 1. Мгновенное поле скоростей в реакционном объеме аппарата**



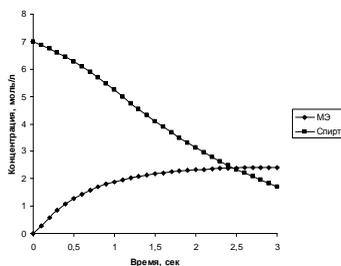
**Рис. 2. Мгновенное поле распределения вектора магнитного потенциала**



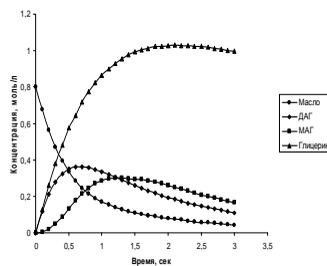
**Рис. 3. Мгновенное поле распределения капель дисперсной фазы по характерным радиусам**



**Рис. 4. Мгновенное поле распределения коэффициента массоотдачи от поверхности капель дисперсной фазы**



**Рис. 5. Кинетика изменения концентрации метиловых эфиров (МЭ) и метанола в реакционной смеси**



**Рис. 6. Кинетика изменения мольной концентрации масла, диацилглицерина (ДАГ), моноацилглицерина (МАГ) и глицерина в реакционной смеси**

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Получение биодизельного топлива: современные тенденции, проблемы и пути их решения / С.А. Нагорнов, С.И. Дворецкий, С.В. Романцова, К.С. Малахов, И.А. Рязанцева // Вопросы современной науки и практики. Университет им. В.И. Вернадского. – 2009. – № 10 (24). – С. 55 – 60.

2. Логвиненко, Д.Д. Интенсификация технологических процессов в аппаратах вихревого слоя / Д.Д. Логвиненко, О.П. Шеляков. – Киев : Техника, 1976. – 144 с.

*Кафедра «Технологии продовольственных продуктов»  
ФГБОУ ВПО «ТГТУ»*