

*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°) 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 Δ – оператор Лапласа; ν – 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 (ε); 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 %.

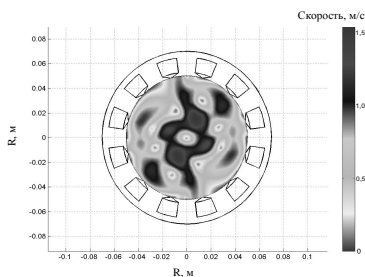


Рис. 1. Мгновенное поле скоростей в реакционном объеме аппарата

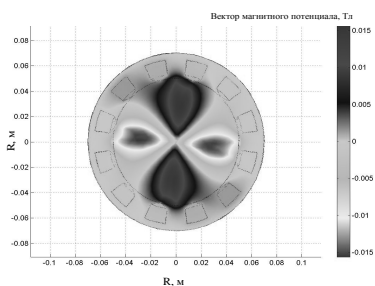


Рис. 2. Мгновенное поле распределения вектора магнитного потенциала

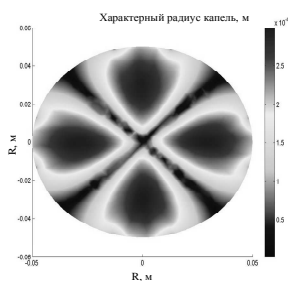


Рис. 3. Мгновенное поле распределения капель дисперсной фазы по характерным радиусам

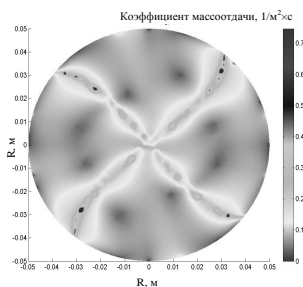


Рис. 4. Мгновенное поле распределения коэффициента массоотдачи от поверхности капель дисперсной фазы

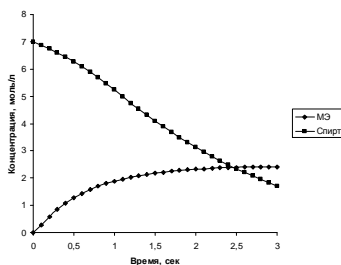


Рис. 5. Кинетика изменения концентрации метиловых эфиров (МЭ) и метанола в реакционной смеси

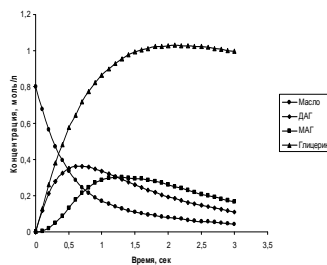


Рис. 6. Кинетика изменения мольной концентрации масла, диацилглицерина (ДАГ), моноацилглицерина (МАГ) и глицерина в реакционной смеси

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»*