УДК 004.942

Д.А.КРЕМЧЕЕВА, Ю.В.ШАРИКОВ
Санкт-Петербургский государственный горный институт (технический университет)

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ДЕКОМПОЗИЦИИ АЛЮМИНАТНЫХ РАСТВОРОВ В КАСКАДЕ АППАРАТОВ ИДЕАЛЬНОГО ПЕРЕМЕШИВАНИЯ

На основании ранее полученной модели процесса декомпозиции в аппарате периодического действия составлена математическая модель процесса декомпозиции в проточном реакторе полного перемешивания с учетом ввода затравки в питание. На основе полученной модели процесса декомпозиции в проточном реакторе составлена модель процесса декомпозиции в каскаде из 14 реакторов проточного типа. Модели составлены в среде программного комплекса ReactOp. Решение уравнения модели выполнялось методом стационирования с использованием метода LSODA для решения обыкновенных дифференциальных уравнений.

On the basis of earlier received of process of decomposition in thedevice of periodic action the mathematical model of process of decomposition in a flow reactor of full hashing in view of input of a priming in a feed is made. On the basis of the received model in a flow reactor the mathematical model of process of decomposition in the cascade of 14 rectors flow type has been developed. Models are made in the inveroment of program complex ReactOp. The solution of the equation of model has been carried out by a stabilization method.

При разработке математической модели процесса декомпозиции алюминатных растворов для одного аппарата периодического действия [1], была решена обратная кинетическая задача и определены параметры разработанной модели: константы скорости реакции и энергия активации. Найденные значения констант зависят только от природы процесса, а значит, их можно использовать при дальнейшем моделировании каскада аппаратов (рис.1).

В качестве начальных использовались данные, взятые из литературных источников и отчетов научно-исследовательских институтов, а также константы, полученные в результате моделирования процесса декомпозиции в аппарате периодического действия.

Процесс образования гидроксида алюминия при взаимодействии алюмината натрия с водой может быть описан уравнениями:

$$NaAlO_2 + 2H_20 \underset{k(-1)}{\overset{k(1)}{\Leftrightarrow}} NaOH + Al(OH)_3(p); \quad (1)$$

$$Al(OH)_3(\text{ð}) \xrightarrow{k(2)} Al(OH)_3(\text{êð}), \quad (2)$$

где $Al(OH)_3$(кр) – концентрация гидроксида алюминия в растворе, кмоль/м^3; $Al(OH)_3$(р) – содержание кристаллов гидроксида алюминия в единице объема реакционной смеси, кмоль/м^3.

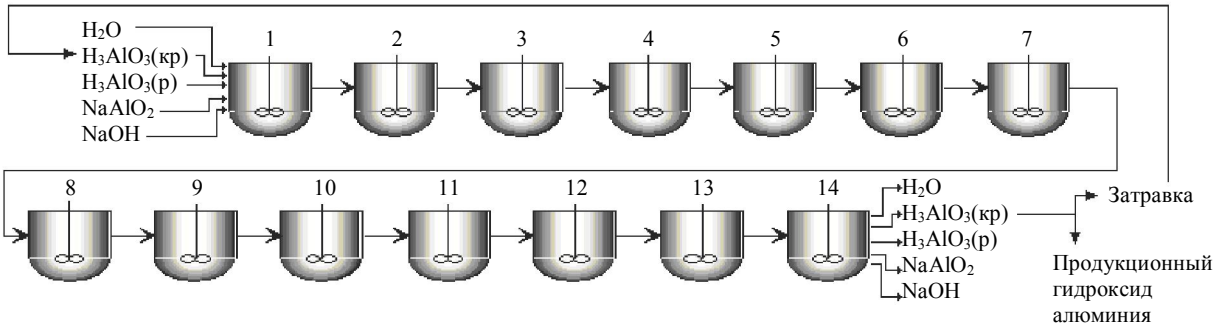


Рис.1. Каскад аппаратов

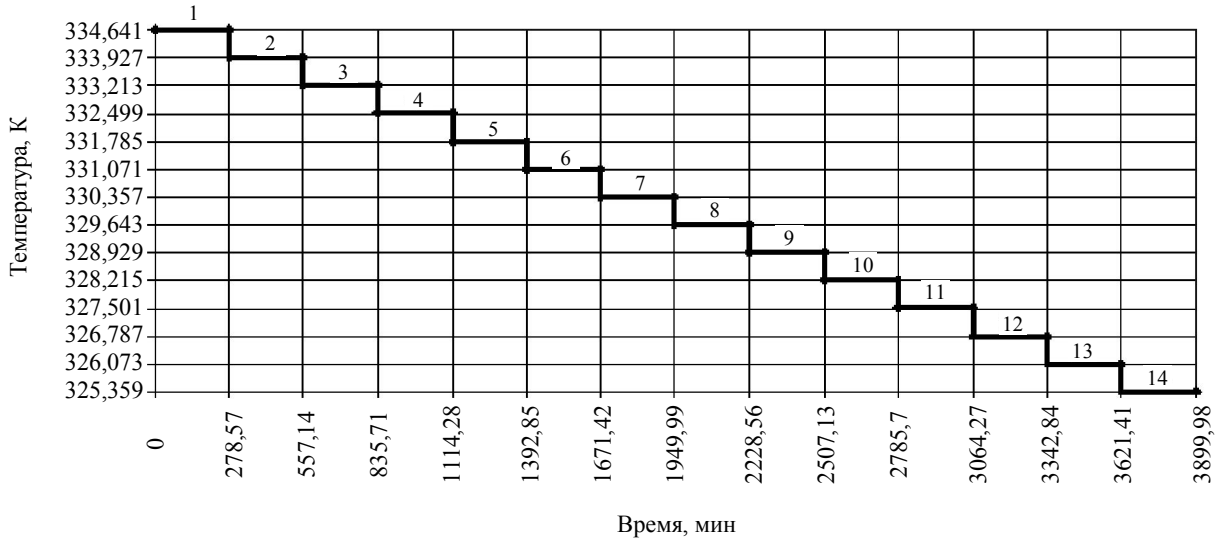


Рис.2. Изменение температуры процесса декомпозиции во времени от 1-го к 14-му декомпозеру

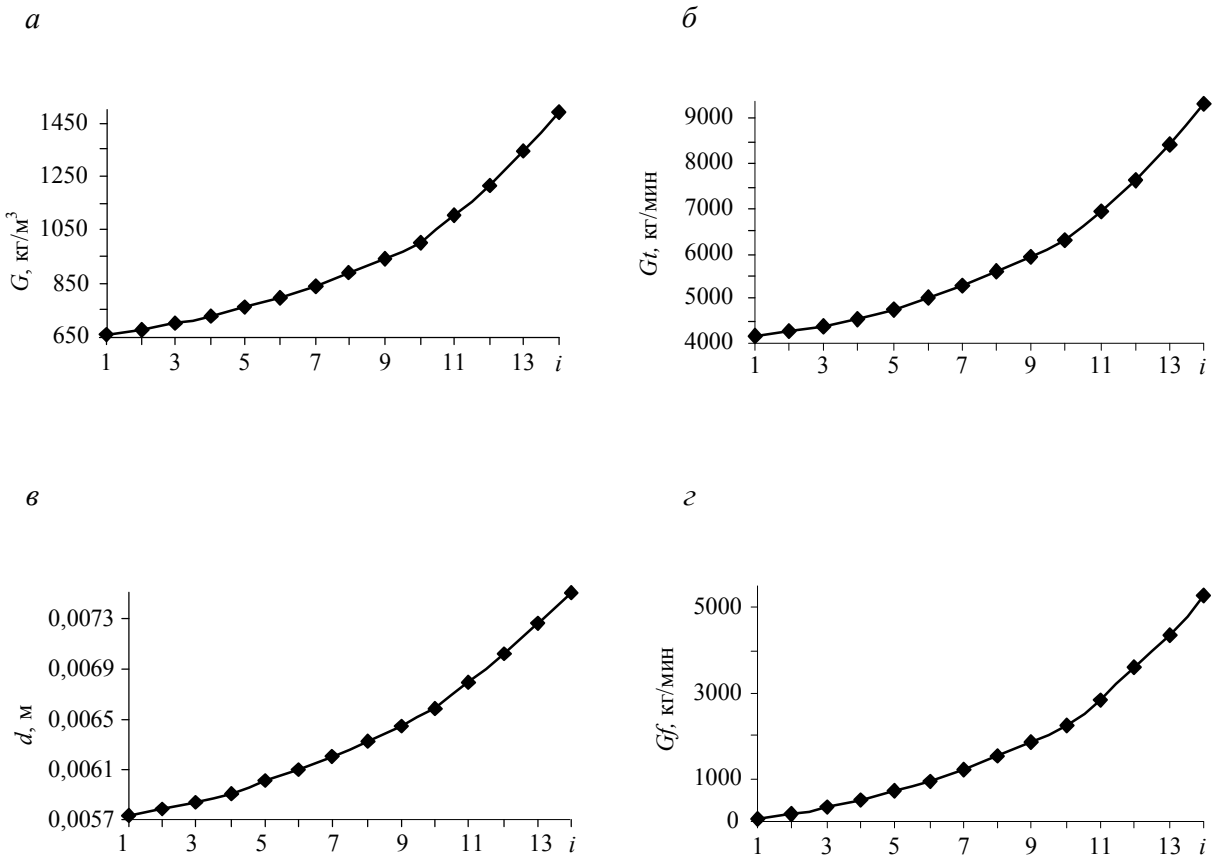


Рис.3. Изменение массы твердой фазы в растворе *G* (*а*), выхода гидроксида алюминия *Gt* (*б*), диаметра частиц затравки *d* (*в*) и массы образовавшегося гидроксида алюминия *Gf* (*г*) в процессе декомпозиции от 1-го к 14-му декомпозеру

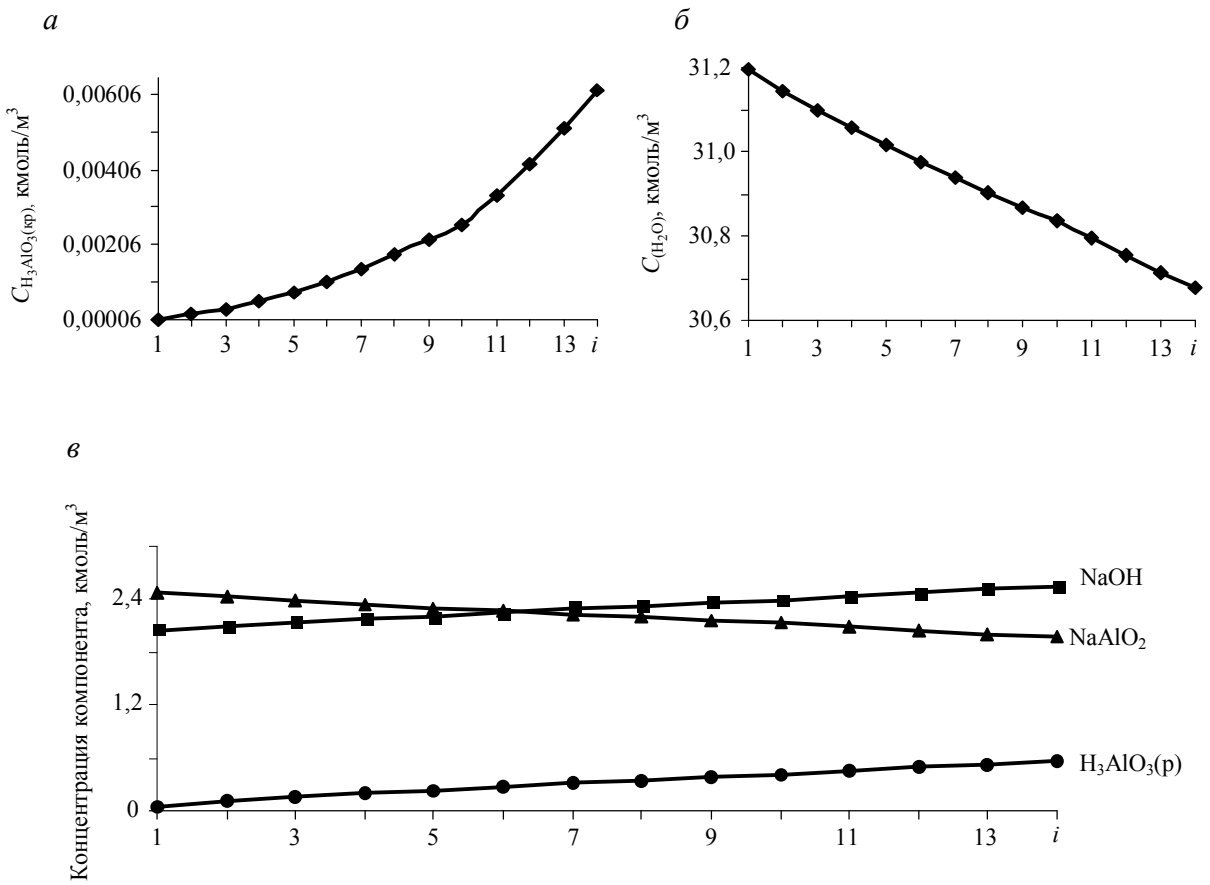


Рис.4. Изменение концентрации различных компонентов в растворе в процессе декомпозиции от 1-го к 14-му декомпозеру

Кинетические параметры этих реакций были найдены в среде программного комплекса ReactOp из условия минимального рассогласования экспериментальных данных, полученных для этого процесса и расчетных данных математической модели, полученной для условия протекания реакций (1) и (2) в реакторе периодического действия при заданном температурном режиме. Значения кинетических параметров для случаев $k(1)$, $k(-1)$ и $k(2)$ соответственно следующие:

$$\ln k_1 = -4{,}466;\ E_1 = 33{,}001 \text{ кДж/моль};$$
$$K_e = k_1/k'_1;\ \ln K_e = 15{,}001;\ E_e = 27{,}588 \text{ кДж/моль};$$
$$\ln k_2 = 6{,}739\ E_2 = 47{,}830 \text{ кДж/моль},$$

где k_1 и k'_1 – константы скорости реакции (1) в прямом и обратном направлении; k_2 – константа скорости реакции (2); K_e – константа равновесия реакции (1); E_e – энергия активации константы равновесия.

В качестве исходного продукта использован алюминатный раствор, содержащий 140 г/л Na_2O и 130 г/л Al_2O_3. «Грубая» затравка состояла из 550 г/л твердой фазы и 25–30 % фракции 45 мкм, «мелкая» затравка – из 100 г/л твердой фазы и 35–45 % фракции 45 мкм.

Полученная модель была использована для моделирования процесса кристаллизации в каскаде из аппаратов непрерывного действия с введением затравки в первый аппарат каскада. Каскад состоит из 14 аппаратов равных объемов. Условия моделирования следующие: объем декомпозера $V = 1800$ м^3; полезный объем декомпозера $V_{пол} = 1746$ м^3; начальная масса затравки $G_0 = 650$ кг/м^3; масса твердой фазы, содержащей фракцию 45 мкм, $G_{45} = 550 \cdot 0{,}3 + 100 \cdot 0{,}45 = 210$ кг/м^3; масса твердой фазы, содержащей фракцию 63 мкм, $G_{63} = 650 - 210 = 440$ кг/м^3; начальный средний диаметр частиц в затравке

$$d_0 = 45G_{45}/(G_{45} + G_{63}) + 63G_{63}/(G_{45} + G_{63}) = $$
$$= 45 \cdot 0{,}32 + 63 \cdot 0{,}68 \approx 57 \text{ мкм};$$

начальная температура процесса $t_{нач} = 62$ °С; конечная температура процесса $t_{кон} = 52$ °С; длительность процесса $\tau = 65$ ч = 3900 мин; объемный расход твердой фазы

$$v = nV_{пол} / \tau = 14 \cdot 1746 / 3900 = 6{,}27 \text{ м}^3/\text{мин};$$

выход твердой фазы гидроокиси алюминия в единицу времени

$$G_t = G_0 v = 650 \cdot 6{,}27 = 4075{,}5 \text{ кг/мин};$$

количество образовавшейся в единицу времени гидроокиси алюминия $G_f = (G - G_0)v = 0$ при $\tau = 0$, здесь G – текущее значение массы твердой фазы в растворе; плотность кристаллов гидроокиси алюминия $d_{sf} = 2440$ кг/м^3; молекулярная масса гидроокиси алюминия $M_{sf} = 78$ кг/кмоль, концентрация компонентов раствора: $C_{NaAlO_2} = 2{,}54$ кмоль/м^3; $C_{NaOH} = 1{,}98$ кмоль/м^3; $C_{H_2O} = 31{,}2$ кмоль/м^3.

Математическая модель процесса в i-м аппарате каскада имеет вид

$$dCi(j)/dt = \frac{v^i}{V^i}[Cf^i(j) - C^i(j)] + R^i(j)$$
$$\text{при } i = 1, \ldots, 14 \; T^i = T^i(t),$$

где i – номер реактора в каскаде; $Cf^i(j)$ – входная концентрация j-го компонента в i-м реакторе, кмоль/м^3; $C^i(j)$ – выходная концентрация j-го компонента в i-м реакторе, кмоль/м^3; v^i – объемный расход твердой фазы в i-ом реакторе, м^3/мин; V^i – объем i-го реактора, м^3; $R^i(j)$ – вектор скорости расхода j-го компонента во всех стадиях i-го реактора; T^i – температура в i-м реакторе, К.

Для решения уравнений модели использовался программный комплекс ReactOp, предназначенный для разработки и решения уравнений математических моделей технологических объектов, в которых происходит превращение исходных продуктов в конечные за счет различных химических превращений. Программирование в данном пакете ведется на языке Фортран.

Экспериментальные данные получены при изменяющейся во времени температуре (рис.2).

В результате моделирования были получены графики, описывающие процесс декомпозиции алюминатных растворов (рис.3 и 4).

Выводы

1. Разработана математическая модель процесса декомпозиции алюминатных растворов в каскаде аппаратов идеального перемешивания.

2. Полученная математическая модель позволяет исследовать влияние распределения температур по аппаратам на выходе твердой фазы и средний размер частиц.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Кремчеева Д.А.* Математическое моделирование процесса декомпозиции алюминатных растворов / Д.А.Кремчеева, Ю.В.Шариков // Записки Горного института. СПб, 2007.Т.173. С. 132–135.

2. *Мазель В.А.* Производство глинозема. Л–М.: Металлургиздат, 1955. 504 с.

3. *Савченко А.И.* Декомпозиция и повышение качества гидроксида алюминия / А.И.Савченко, К.Н.Савченко. М.: Металлургия, 1992. 156 с.

4. *Шариков Ю.В.* Моделирование процессов и объектов в металлургии: Учеб. пособие / Ю.В.Шариков, И.Н.Белоглазов, А.Ю.Фирсов; СПГГИ(ТУ). СПб, 2006. 83 с.