Цей клас задач відноситься вже до третього рівня ієрархічної структури хіміко-технологічного процесу – до рівня робочої зони апарату. Потік речовини організується зовнішніми силами і його характер залежить від конструктивних особливостей апарату. Тут важливі деталі: звідки і яким чином подається потік знизу, зверху, збоку; через крапкові джерела або суцільним потоком (перфороване дно або стіни); як поводиться тверда фаза – нерухома або переміщається, і як переміщається – з допомогою механічних мішалок, струшувачів, газовим потоком (киплячий шар) і т.д.

Для аналізу гомогенних потоків досить мати відомості про кінетику процесу в потоку, а для аналізу гетерогенних систем потрібні додатково дані про розвиток явищ перенесення, як в об'ємі апарату, так і біля реакційної поверхні окремої частинки.

Структура будь-якого потоку досить складна. Відомо, що потоки бувають ламінарними і турбулентними. При постійній витраті газу або рідини ламінарний потік є стаціонарним, тобто має певний розподіл швидкостей по об'єму апарату. У той же час турбулентний потік завжди нестаціонарний – в ньому спостерігається безперервний хаотичний перерозподіл швидкостей рухомих часток в кожній точці простору. Це сприяє перемішуванню потоку і усередненню його складу. Але у деяких випадках турбулізація потоку може привести до крайніх виявів його неоднорідності – виникненню застійних зон або, навпаки, зон циркуляції в напрямі потоку. Потрібно враховувати, також, розвиток поперечного і подовжнього перемішування.

Для первинного опису процесів з участю потоків користуються моделями ідеальних потоків — *модель ідеального змішання* і *модель ідеального витіснення*. Апарати, в яких мають місце вказані потоки, називають відповідно реакторами ідеального змішання або ідеального витіснення. Прикладом реактора ідеального змішання може бути посудина з мішалкою для суспензій і емульсій, або апарат киплячого шару, барботер, струшувач і ін. Неодмінною ознакою такого реактора є рівність властивостей часток потоку середньому значенню для всього об'єму реактора. У моделюванні його називають об'єктом із зосередженими параметрами, – процес в реакторі може бути описаний як процес в одній довільній частці потоку.

Для реактора ідеального витіснення прийнято, що потік рухається абсолютно рівномірно і в будь-якому поперечному перетині потоку швидкості рухомих часток однакові, також як температура і концентрації компонентів. Час перебування часток в реакторі ідеального витіснення один для всіх часток і дорівнює середньому часу (t<sub>cp</sub>)

 $t_{cp} = V_{peak}/w,$ де  $V_{peak}$  – об'єм реактору, м<sup>3</sup>; w – швидкість потоку, м<sup>3</sup>/с.

Прикладом реактора ідеального витіснення може служити реактор з нерухомим зернистим шаром. Потік газу або рідини, що входить в такий шар, інтенсивно вирівнюється за швидкостями і складом. Прекрасною ілюстрацією моделі такого реактора є плівковий розходомір, – рухома мильна плівка розділяє об'єм газу, що витісняється новою порцією або іншим газом. У циліндричному реакторі така плівка рухається рівномірно при постійній витраті газу. Для реактора заповненого зернистим матеріалом рушення рідини або газу подібно рушенню поршню і в ідеальному варіанті опису будь-який диференціальний шар потоку можна приймати за рухому плівку з однаковими властивостями в радіальному напрямі.

У багатьох випадках модель ідеального реактору, дає достатнє наближення до процесів в оригіналі і дослідник нею обмежується. При необхідності більш точного наближення моделі до оригіналу вносяться уточнення в ідеальну модель реактору. Так, наприклад, для реактору ідеального витіснення можуть вводитися «розмиття фронту потоку» – умовно зване подовжньою дифузією і нерівномірність властивостей часток потоку в радіальному напрямі – поперечна (латеральна) дифузія. Урахування цих явищ значно ускладнює модель. ішення про міру складності моделі, що розробляється приймає дослідник, керуючись поставленою метою моделювання. Підвищення складності моделі виправдане, наприклад, у разі використання її для поглиблення знань про механізм процесу і при оцінці значущості параметру, що досліджується. Якщо ж модель є проміжною ланкою, тобто грає роль моделі підсистеми складного процесу, то від неї потрібна гарантована надійність зв'язків вхідних і вихідних параметрів. У цьому випадку бажано мінімізувати число параметрів моделі, залишаючи параметри порівнянні за їхнім впливом на цільову функцію. Ці параметри вважаються значущими.

Одним з прикладів використання моделі реактора ідеального витіснення і змішування може служити описана вище модель агрегату ГВКШ (газифікатор вугілля конвертер-шахта). Ідея реактору ідеального витіснення застосована тут для опису нагріву стовпа вугілля потоком газу. Властивості реактору ідеального змішання використані для опису процесів в рідкому металі – нижньої частини реактору.

Розглянемо процес в реакторі ідеального витіснення для системи «газ-тверде». Основним рівнянням в цьому випадку, що об'єднує процеси в окремих дробових шарах реактору, є рівняння перенесення (див., наприклад, рівняння 3.88).

## Кінетика відновлення шару твердих залізорудних матеріалів газом

Під шаром залізорудних матеріалів будемо розуміти насипний стовп твердої шихти, що складається з однорідних за складом і розміром кускових матеріалів – обкотишів, шматочків агломерату або руди. Такий стовп шихти умовно розбивається на задане число дробових шарів рівної висоти, через які продувається відновлювальний газ.

Розміри стовпу шихти і характер процесів, що розвиваються в шарі матеріалів, визначається формою реактору й умовами руху шихтових матеріалів і газу. Розрізняють два основних типи реакторів – реактори нерухомого і рухливого шару. Вони можуть встановлюватися у вертикальному положенні або похило. В останньому випадку реактори обертаються навколо подовжньої осі.

При подачі газу знизу в стовп шихти в залежності від швидкості газового потоку стовп шихти може бути нерухомим з фіксованим положенням часток, розширеним з частковим (коливальним) переміщенням часток, або киплячим з безладним переміщенням часток по всьому обсязі реактора.

При рухливому стовпі шихти газ може подаватися: назустріч потокові шихти (протиточні реактори); у тім же напрямку, що і потік шихти (прямоточні реактори); або під кутом до шихти, що рухається, (апарати з поперечним потоком).

Кожен окремий варіант організації обробки стовпа шихти відновлювальним газом описується окремо. Загальними для усіх випадків відновлення в зазначених реакторах є процеси в окремій частці твердої шихти, для якої зовнішні умови (склад і швидкість потоку газу, температура) задаються властивостями конкретного реактору. Розглянемо кінетику відновлення шихти в реакторі нерухомого шару. Реактор являє собою вертикальний циліндр, заповнений сферичними (або приведеними до сферичної форми) частками радіусом  $R_0$ , через який продувається нагрітий відновлювальний газ. Реактор може обігріватися і через бічну поверхню. Розподіл температури уздовж стовпа шихти задається T(0,x). Задається також склад і швидкість газового потоку на вході в реактор C( $\tau$ ,0) і G( $\tau$ ,0). У радіальному напрямку властивості потоку однакові, а по вертикалі склад газу обчислюється за рівнянням переносу:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \frac{u_{\text{лин}}}{e_{c\pi}} \frac{\partial C_i}{\partial x} + v_i = 0.$$
(3.92)

Тут С<sub>i</sub> – концентрація газу-відновника, моль/см<sup>3</sup>.  $u_{nih}$  – лінійна швидкість газу в порожньому реакторі, см/с;  $e_{cn}$  – порозність шару, (-);  $v_i$  – швидкість відновлення, моль/см<sup>3</sup>с.

Швидкість відновлення *i-го* дробового шару стовпа шихти чисельно дорівнює швидкості витрати відновлювача на процес у цій ділянці стовпа шихти, що відбиває на складі вихідних з нього газів.

Швидкість відновлення є загальною для відновлення окремого зразка і знаходиться з відповідної моделі процесу відновлення сферичного зразка, розглянутої раніше.

Використовуємо найбільш просту модель відновлення сферичного зразку  $Fe_2O_3$  - поліфронтальну (ПФМ). У ній загальна швидкість чисельно дорівнює швидкості просування фронту вютит/залізо ( $V_{Fe}$ ).

Рівняння (3.92) у даному випадку вирішується чисельно з використанням методу кінцевих від'ємностей. Для напівнескінченного стовпа шихти, як і для стовпа обмеженої довжини, що не має граничної умови для вихідного кінця реактору, можна скористатися тільки явною схемою розрахунку. Для цього замінимо в рівнянні (3.92) похідні на кінцеві від'ємності:

$$\frac{\partial C}{\partial t} \cong \frac{C_i - C_i}{\Delta t} \quad i \quad \frac{\partial C}{\partial x} \cong \frac{C_i - C_{i-1}}{\Delta x}, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$
(3.93)

Тут  $C_i$  і  $C_i - концентрації газу-відновника на даному і попередньому кроці за часом, відповідно.$ 

Після підстановки (3.93) у (3.92) і перетворень одержимо систему алгебраїчних рівнянь

$$C_{i} = (1 - K_{\tau}) \cdot C_{i} + K_{\tau} \cdot C_{i-1} - z \cdot w_{i}, i = 1, 2, ..., n;$$
(3.94)

де:  $K_{\tau} = \frac{U_{x}\Delta t}{e_{cx}\Delta x}$ ,  $z = \frac{D\Delta t}{2pR_{R}^{2}}$ ,  $w_{i}$  – загальна швидкість процесу відновлення

одного обкотишу за ПФМ у безрозмірних координатах ( $w_i = v_i / \text{CDr}_0$ ).

Рішення системи (94) ведеться методом рахунку, що біжить.

Приведемо результати обчислювальних експериментів на моделі лінійного шару (LS). Лінійний шар набраний з 7 обкотишів радіусом 0.85 см у реакторі діаметром 1,9 см. У моделі передбачене завдання температури для кожного обкотишу, у залежності від характеру розподілу температур у реакторі, але дані досліди проведені при однаковій температурі обкотишів у реакторі.



Рис. 3.12. Кінетика відновлення окремих обкотишів (N21-N27) і стовпа в цілому (жирна лінія) при T=1273K і витраті H<sub>2</sub> 5 см<sup>3</sup>/с

Дослідження проведене при T=1173K, 1273K й 1373K і витраті водню 5 см<sup>3</sup>/с. Вплив витрати відновника перевірялося в інтервалі  $1\div7$  см<sup>3</sup>/с при T=1273K. Форма кінетичних кривих при всіх зазначених умовах практично не мінялася. Змінювався, природно, лише час повного відновлення стовпа обкотишів і індивідуальних зразків обкотишів.

Вплив температури на кінетику відновлення всього стовпчика обкотишів показане на рис. 3.13. Швидкість відновлення стовпчика обкотишів росте з ростом температури. При ступені відновлення 30% спостерігається різке уповільнення швидкості відновлення стовпчика, причина якого видна з рис. 3.12.

Можна бачити, що вже починаючи з другого обкотиша виявляється ефект гальмуючого впливу газоподібного продукту відновлення на кінетику відновлення обкотиша. Практичне завершення відновлення попередніх обкотишів збільшує швидкість відновлення даного обкотиша до граничної для заданих умов величини, про що свідчить паралельність кінетичних кривих на кінцевих ступенях відновлення (рис. 3.12).



Рис. 3.13. Кінетика відновлення стовпчика з 7 обкотишів при трьох температурах. Витрата водню 5 см<sup>3</sup>/с.