



Научная статья

2.6.13. Процессы и аппараты химических технологий (технические науки)

УДК 66.011

doi: 10.25712/ASTU.2072-8921.2022.03.027



EDN: VGHNOK

ИССЛЕДОВАНИЕ УРАВНЕНИЙ ЯЧЕЕЧНОЙ СТРУКТУРЫ ПОТОКОВ В ПРОЦЕССАХ И АППАРАТАХ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Любовь Юрьевна Александрова¹, Павел Георгиевич Ганин²,
Алла Валентиновна Маркова³, Александр Иванович Мошинский⁴,
Лариса Николаевна Рубцова⁵, Владислав Валерьевич Сорокин⁶

^{1, 2, 3, 4, 5, 6} Санкт-Петербургский государственный химико-фармацевтический университет,
Санкт-Петербург, Россия

¹ lubov.aleksandrova@pharminnotech.com, <https://orcid.org/0000-0002-4444-1030>

² pavel.ganin@pharminnotech.com, <https://orcid.org/0000-0002-9890-2082>

³ alla.markova@pharminnotech.com, <https://orcid.org/0000-0002-1317-6238>

⁴ alexander.moshinsky@pharminnotech.com, <https://orcid.org/0000-0001-7135-0823>

⁵ larisa.rubtsova@pharminnotech.com, <https://orcid.org/0000-0003-1687-1890>

⁶ vladislav.sorokin@pharminnotech.com, <https://orcid.org/0000-0002-7262-0941>

Аннотация. При проведении химических, массообменных или тепловых процессов в аппаратах идеального вытеснения концентрации рабочих веществ (или температуры) показатели непрерывно меняются от входа к выходу по длине (высоте) аппарата. В аппаратах идеального смешения происходит полное выравнивание концентраций (или температур) по всему аппарату, причем в любой точке они равны значениям соответствующих величин на выходе потока. Для обоих этих случаев методы расчета скоростей процессов и размеров соответствующих аппаратов хорошо разработаны.

Этой идеализированной физической модели отвечает математическая модель – уравнение или система уравнений, посредством которых расчетом определяется вид функции распределения времени пребывания. Далее сопоставляют реально полученный опытным путем (из кривых отклика) вид функции распределения с результатом расчета на основании выбранной идеальной модели при различных значениях ее параметра (или параметров). В результате сравнения устанавливают, соответствует ли с достаточной степенью точности выбранная модель реальной гидродинамической структуре потока в аппарате данного типа, т.е. адекватна ли модель объекту. Затем находят те численные значения параметров модели, при которых совпадение опытной и расчетной функций распределения наилучшее. Указанные значения в дальнейшем применяют при расчете процесса в конкретном аппарате. Обобщая эти данные, получают уравнения для расчета значений параметров модели при разных гидродинамических условиях работы и размеров аппаратов данного типа.

В настоящее время для описания структуры потоков наиболее часто используют две модели: ячеечную и диффузионную.

Ключевые слова: ячейка, перемешивание, модели, метод возмущений, структура потоков, массообмен, реактор, производящая функция, дисперсия вещества, промывка осадка.

Для цитирования: Исследование уравнений ячеечной структуры потоков в процессах и аппаратах химической технологии / Л. Ю. Александрова [и др.] // Ползуновский вестник. № 3, 2022. С. 194 – 203. doi: 10.25712/ASTU.2072-8921.2022.03.027. EDN: <https://elibrary.ru/vghnok>.

Original article

INVESTIGATION OF THE EQUATIONS OF THE CELL STRUCTURE OF FLOWS IN PROCESSES AND APPARATUS OF CHEMICAL ENGINEERING

Lyubov Yu. Alexandrova¹, Pavel G. Ganin², Alla V. Markova³,
Alexander I. Moshinsky⁴, Larisa N. Rubtsova⁵, Vladislav V. Sorokin⁶

^{1, 2, 3, 4, 5, 6} Saint Petersburg State University of Chemistry and Pharmacy, Saint Petersburg, Russia

¹ lubov.aleksandrova@pharminnotech.com, <https://orcid.org/0000-0002-4444-1030>

² pavel.ganin@pharminnotech.com, <https://orcid.org/0000-0002-9890-2082>

³ alla.markova@pharminnotech.com, <https://orcid.org/0000-0002-1317-6238>

⁴ alexander.moshinsky@pharminnotech.com, <https://orcid.org/0000-0001-7135-0823>

⁵ larisa.rubtsova@pharminnotech.com, <https://orcid.org/0000-0003-1687-1890>

⁶ vladislav.sorokin@pharminnotech.com, <https://orcid.org/0000-0002-7262-0941>

Abstract. During chemical, mass transfer or thermal processes in ideal displacement apparatuses, the concentrations of working substances (or temperatures) continuously change from inlet to outlet along the length (height) of the apparatus. In ideal mixing apparatuses, concentrations (or temperatures) are completely equalized throughout the apparatus, and at any point they are equal to the values of the corresponding values at the flow outlet. For both of these cases, the methods for calculating the speeds of processes and the sizes of the corresponding devices are well developed.

This idealized physical model corresponds to a mathematical model – an equation or a system of equations by means of which the type of the residence time distribution function is determined by calculation. Next, the type of the distribution function actually obtained experimentally (from the response criteria) is compared with the calculation result based on the selected ID model for different values of its parameter (or parameters). As a result of the comparison, it is established whether the selected model corresponds with a sufficient degree of accuracy to the real hydrodynamic structure of the flow in the apparatus of this type, i.e. whether the model is adequate to the object. Then the numerical values of the model parameters are found, at which the coincidence of the experimental and calculated distribution functions is the best. The specified values are subsequently applied when calculating the process in a particular device. Generalizing these data, equations are obtained for calculating the values of model parameters under different hydrodynamic operating conditions and sizes of devices of this type.

Currently, two models are most often used to describe the flow structure: cellular and diffusion.

Keywords: cell, mixing, models, perturbation method, flow structure, mass transfer, reactor, generating function, dispersion of matter, sludge washing.

For citation: L. Yu., Alexandrova, P. G., Ganin, A. V., Markova, A. I., Moshinsky, L. N., Rubtsova & V. V., Sorokin. (2022). Investigation of the equations of the cell structure of flows in processes and apparatus of chemical engineering. *Polzunovskiy vestnik*, (3), 194-203. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.2072-8921.2022.03.027.

ВВЕДЕНИЕ

Процессы химической технологии – это сложные физико-химические явления. Участвующие в них потоки вещества, как правило, многофазные и многокомпонентные. В ходе протекания процесса в каждой точке фазы и на границах раздела происходит перенос импульса, энергии, массы. Как же изучать химико-технологические процессы? Ключ к решению этой проблемы дает метод математического моделирования, базирующийся на *POLZUNOVSKIY VESTNIK № 3 2022*

стратегии системного анализа. Под математическим моделированием понимают изучение свойств объекта на математической модели. Его целью является определение оптимальных условий протекания процесса, управление им на основе математической модели и перенос результатов на объект. Существует много моделей. Мы остановимся на ячеечной, т. к. типовые модели идеального перемешивания, идеального вытеснения часто неадекватны реальному процессу, а диффузионная

модель отличается сложностью. По этой причине для трубчатых и колонных аппаратов, а также для каскадов последовательно расположенных реакторов удобнее представлять реальные потоки в виде ячеечной модели.

Намного сложнее описать и учесть реальное поле концентраций или температур при расчете аппаратов со структурой потоков промежуточного типа [1–5].

Для описания действительной картины изменения концентраций (или температур) в этих аппаратах необходимо иметь какую-то количественную меру степени перемешивания, т.е. степени отклонения реальной гидродинамической структуры потока от структуры, отвечающей идеальному вытеснению или идеальному смешению. Чтобы найти такую меру, выраженную численными значениями какого-либо одного или нескольких параметров, обычно прибегают к описанию структуры потока при помощи той или иной упрощенной модели, или физической схемы, более или менее точно отражающей действительную физическую картину движения потока [3–6].

Классическая теория дисперсии вещества Тейлора с постоянным значением коэффициента эффективной диффузии часто не может описать тепломассообменных ситуаций в аппаратуре, тогда целесообразно перейти к моделированию процесса уравнениями ячеечных моделей. Это связано с тем, что работа Тейлора и многие другие работы по теории дисперсии оперируют с одномерными профилями течения жидкости, одинаковыми для любого сечения канала. Фактически теория Тейлора рассматривает технологический аппарат аналогичным (по течению жидкости в нем) некоторой трубе. Данное обстоятельство приводит к независимости от продольной координаты коэффициента дисперсии D^* . Со всем другая ситуация возникает, когда течение в трубе не одномерное. В реальных аппаратах химической технологии обычно так и бывает. В них присутствуют (или могут присутствовать) перегородки, отверстия в них, мешалки различных типов и другие факторы, делающие гидродинамическое течение в аппарате достаточно сложным. В случае не одномерного течения в аппарате если и возможно применить теорию Тейлора, то, как правило, коэффициент дисперсии будет зависеть от продольной координаты [7, 8].

Цели работы: 1. Продемонстрировать применение метода производящих функций для решения уравнений ячеечных моделей. 2. Продемонстрировать применение метода малых возмущений. 3. Рассмотреть принципы работы различных аппаратов, используемых в

производстве лекарственных препаратов, на основании ячеечной модели структуры потоков. 4. Указать на неточности описания результатов анализа ячеечных моделей, рекомендованных в учебниках.

1. Ячеечная модель структуры потоков в аппаратах.

В химической технологии и смежных отраслях промышленности имеют широкое распространение аппараты, представляющие собой несколько последовательно соединенных одинаковых элементов, в каждом из которых вещество потока интенсивно перемешивается. Это может быть каскад (последовательность) аппаратов с механической мешалкой в каждом из них, или секционированный аппарат с псевдооживленными слоями дисперсного материала в каждой из последовательных секций, или тарельчатый массообменный аппарат с перемешиванием фаз вследствие энергичного барботажа пузырьков газа или пара через слой жидкости на каждой тарелке. Поведение потоков в аппаратах такого рода можно представить с помощью ячеечной модели полного перемешивания. Данная модель используется на практике, чтобы в любой момент времени проследить изменение концентраций (температур). Модель реализуется, когда процесс тепломассопереноса влияет только на процессы, (в простейшем варианте) происходящие в последующей ячейке, но не в предыдущей. Следовательно, главным и, в простейшем случае, единственным параметром ячеечной структуры потоков является число таких ячеек n , на которые можно мысленно разбить аппарат, чтобы получить реально достигаемую в нем степень перемешивания потока. В более сложных вариантах (обратные потоки, застойные зоны и т.п.) появляются дополнительные параметры. Аналитические исследования подобных задач достаточно сложны. Некоторые результаты данных структур приведены в работах [3, 5, 9–11].

2. Использование модели ячеечной структуры потоков в химико-технологических процессах (в производстве лекарственных препаратов).

Определенная часть химико-технологических процессов протекает в проточных аппаратах полного смешения, соединенных последовательно в каскад. Исходные компоненты реакции поступают в первый реактор каскада, а целевой продукт отбирается на выходе из последнего реактора. В этом случае поток, выходящий из предыдущего реактора (за исключением последнего реактора в каскаде), подается на выход следующего реактора. При моделировании технологического

процесса каскад последовательно соединенных реакторов может быть представлен ячеечной моделью структуры потоков. Рассмотрим применение этой модели в производстве лекарственных препаратов. Именно это можно проследить в производстве лекарств, где есть следующие стадии: кристаллизации, экстрагирования, окисления, ацетонирования [12].

При производстве некоторых биотехнологических препаратов также используется ячеечная модель структуры потоков [13]. При гетерогенном непрерывном процессе несколько ферментаторов соединены вместе (они представляют собой каскад аппаратов с мешалками). Питательная среда поступает в первый аппарат, готовая культуральная жидкость вытекает из последнего. В этом случае имеет место непрерывный поток питательной среды, но клетки не обеспечены постоянными условиями роста (каждый аппарат представляет собой особые условия культивирования).

При непрерывном культивировании микроорганизмов нужно отрегулировать скорости притока питательной среды и вытекания культуральной жидкости, чтобы предотвратить вымывание культуры из системы, т.е. обеспечить постоянную концентрацию клеток [14]. В стерильных условиях непрерывный проточный метод обеспечивает сохранение культуры в физиологически активном состоянии в течение длительного времени. Однако этот процесс можно использовать в том случае, если культура при длительном выращивании не теряет способности к синтезу, ну и так же важную роль играет подбор оптимальных условий.

Так же в условиях фармацевтической промышленности при приготовлении лекарственных препаратов часто используют аппараты с псевдооживленным слоем, многокорпусные выпарные аппараты, которые зачастую можно смоделировать с помощью ячеечной структуры потоков.

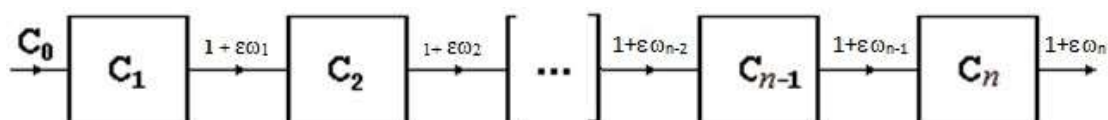


Рисунок 1 - Схема ячеечной модели

Figure 1 - Diagram of the cellular model

3. Метод малых возмущений.

Рассмотрим модель, состоящую из n ячеек, к примеру, возьмем каскад аппаратов с механическими мешалками. Между аппаратами нет циркуляционного перемешивания, но в каждом отдельном аппарате достигается полное перемешивание. Модель используется для расчета теплообменных и массообменных процессов. Заметим, что ячейки могут возникать и без секционирования объема аппарата [15].

Представим эти ячейки в качестве последовательности, в каждой ячейке вещество имеет определенную концентрацию и определенный объем.

Предположим, что в ячейках происходит идеальное перемешивание. Тогда в некоторой ячейке j мы можем представить материальный баланс следующим образом:

$$V_j \frac{dC_j}{dt} = Q(C_{j-1} - C_j), \quad (1)$$

$j = 1, 2, \dots, n$,

где V_j – объем j -той ячейки, C_j – концентрация вещества в ячейке, Q – объемный расход вещества, n – число ячеек. $V_j dC_j/dt$ – изменение

массы целевого вещества в j -той ячейке, QC_{j-1} – приток вещества в j -тую ячейку, QC_j – отток вещества из j -той ячейки.

Предположим, что $\tau_j = V_j/Q$ (τ_j – параметр, представляющий безразмерное время), причем все V_j достаточно близки, t^* – характерная величина для τ_j . При этом уравнения (1) принимают вид:

$$\begin{aligned} \frac{dC_j}{dt} &= \frac{t^*}{\tau_j} (C_{j-1} - C_j) = \\ &= (1 + \varepsilon\omega_j)(C_{j-1} - C_j), \end{aligned} \quad (2)$$

где ε – малый параметр, чей модуль будет заметно меньше единицы, $\omega_j = (t^* - \tau_j)/(\varepsilon\tau_j)$ – величина порядка единицы по ε . При $\varepsilon = 0$, $\tau_j = t^* = \text{const}(j)$, следовательно $V_j = \text{const}(j)$. В общем случае $C_0 = C_0(t)$ – заданная функция времени. Уравнение (2) дополняют начальные условия:

$$C_j(0) = w_j, \quad j = 1, 2, \dots, n \quad (3)$$

Функция C_0 выражает приток вещества в первую ячейку извне. Рассмотрим частную задачу. $C_0 = 0$, $C_1 = 1 = w_1$, $w_j = 0 (j \geq 1)$.

Фактически выбор $w_1 = 1$ соответствует переходу к безразмерной концентрации. Введем также безразмерное время по формуле $\tau = Qt/V$, при $V_j = V = \text{const}$.

Решение системы (2) при $\varepsilon = 0$.

Примем условия: поступающая на вход системы концентрация $C_0 = 0$, концентрация в первой ячейке $C_1(0) = 1$, концентрации же в последующих ячейках также примем равными нулю в начальный момент времени, то есть мы рассматриваем процесс, введения вещества (трассера) только в одной (первой) ячейке. Количество ячеек может быть любым ($2 < j \leq n$). Существует несколько подходов к анализу процессов тепломассопереноса в ячейечных структурах. Отметим оригинальный метод исследования [16].

Введем производящую функцию для концентрации C_j , согласно зависимости [6]:

$$\Phi(\tau, \lambda) = \sum_{j=1}^{\infty} \lambda^j C_j(\tau). \quad (4)$$

Производящая функция часто выступает как особый способ решения ряда задач теории вероятности [17, 18]. Она также встречается в теории специальных функций. В производящей функции мы ввели λ – это параметр, через который величины $C_j(\tau)$ можно выразить через ряд Маклорена.

$$C_j(\tau) = \frac{1}{j!} \left. \frac{d^j \Phi}{d\lambda^j} \right|_{\lambda=0}. \quad (5)$$

Применим операцию введения производящей функции к уравнениям (2), то есть умножаем соответствующее уравнение на λ^j и суммируем по j от единицы до бесконечности, в итоге получаем следующее выражение:

$$\frac{d\Phi}{d\tau} = \sum_{j=1}^{\infty} \lambda^j C_{j-1} - \sum_{j=1}^{\infty} \lambda^j C_j = \sum_{j=2}^{\infty} \lambda^j C_{j-1} - \Phi = (\lambda - 1)\Phi$$

Начальные условия для полученного выражения будут следующими:

Безразмерное время $\tau = 0$. При этом

$$\Phi(0, \lambda) = \sum_{j=1}^{\infty} \lambda^j C_j(0) = \lambda.$$

Тогда решение уравнения для функции Φ с подстановкой начальных условий примет следующий вид:

$$\begin{aligned} \Phi(\tau, \lambda) &= \lambda \exp[(\lambda - 1)\tau] = \\ &= \exp(-\tau) \lambda \exp(\lambda\tau). \end{aligned}$$

Используя ряд Маклорена, или разлагая экспоненту в ряд по степеням λ [19], мы получим следующее выражение:

$$\Phi(\tau, \lambda) = \exp(-\tau) \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\lambda^{j+1}}{j!} \tau^j.$$

Принимая во внимание это выражение и (4), (5), находим концентрации в любой момент времени по следующей формуле

$$C_j(\tau) = \exp(-\tau) \frac{\tau^{j-1}}{(j-1)!},$$

где $j = 1, 2, \dots, n$. Отметим, что $0! = 1$ по определению.

Рассмотрим теперь случай $\varepsilon \neq 0$.

Принимаем те же дополнительные условия что и в варианте $\varepsilon = 0$.

$$C_0 = 0, C_1(0) = 1, C_j(0) = 0 \quad j \geq 2.$$

В данном случае поставленная задача также имеет решение. Его можно получить последовательно от ячейки к ячейке при помощи рекуррентной формулы, однако эти решения получаются слишком громоздкими (трудно обозримыми) и поэтому не совсем рациональными, к тому же в практических задачах значения τ_j очень близки друг к другу. Поэтому целесообразным является использование метода малого параметра [20–23]. Согласно этому методу, решение задачи раскладывается в виде формулы (разложение в ряд Маклорена):

$$\begin{aligned} C_j(\tau) &= C_j^0(\tau) + \varepsilon C_j^1(\tau) + \\ &+ \varepsilon^2 C_j^2(\tau) + \dots \end{aligned}$$

Далее это выражение подставляем в уравнение и заданные начальные условия, затем проводим группировку слагаемых одинакового порядка по ε и приравниваем полученное выражение к нулю. В главном (нулевом) приближении по ε имеем уже ранее рассмотренную задачу:

$$\frac{dC_j^0}{d\tau} = C_{j-1}^0 - C_j^0, \quad C_0^0 = 0,$$

$$C_j^0 = \begin{cases} 1, & j=1 \\ 0, & j>1 \end{cases}.$$

Решение которой представляет найденная выше формула:

$$\begin{aligned} C_1^1(\tau) &= C_1^0(\tau) + \varepsilon C_1^1(\tau) = \\ &= e^{-\tau} - \varepsilon w_1 e^{-\tau} + O(\varepsilon^2) \end{aligned} \quad (6)$$

$$C_j^0(\tau) = \exp(-\tau) \frac{\tau^{j-1}}{(j-1)!}.$$

Задача для функций $C_j^1(\tau)$ согласно всему вышесказанному, будет формулироваться следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{dC_j^1}{d\tau} &= (C_{j-1}^1 - C_j^1) + w_j (C_{j-1}^0 - C_j^0) = \\ &= (C_{j-1}^1 - C_j^1) + w_j \frac{dC_j^1}{d\tau} \\ C_0^1 &= 0, C_j^0 = 0 \end{aligned}$$

$j = 1, 2, 3, \dots, n$

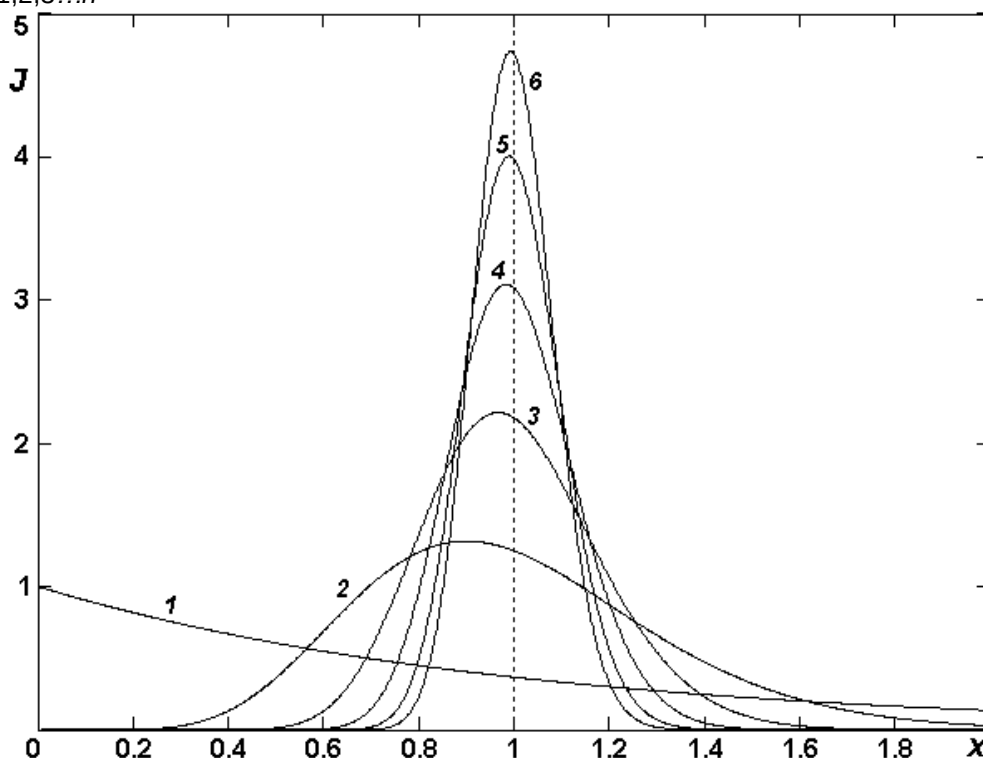


Рисунок 2 - Графики функций (*): 1 - $n = 1$; 2 - $n = 10$; 3 - $n = 30$; 4 - $n = 60$; 5 - $n = 100$; 6 - $n = 140$

Figure 2 - Graphs of functions (*): 1 - $n = 1$; 2 - $n = 10$; 3 - $n = 30$; 4 - $n = 60$; 5 - $n = 100$; 6 - $n = 140$

Преобразование двучленного разложения полученного решения.

Для первой ячейки имеем следующее разложение:

Для функции $C_j^1(\tau)$ имеем следующие уравнения:

$$\frac{dC_j^1}{d\tau} = -C_j^1 - w_1 C_1^0 \Rightarrow \left[e^\tau C_j^1 \right]'_\tau = -w_1$$

После интегрирования

$$C_1^1(\tau) = -w_1 \tau e^{-\tau}$$

Аналогично при $j = 2$ находим:

$$C_2^1(\tau) = e^{-\tau} \left\{ w_2 \tau - \left[\frac{w_1 + w_2}{2} \right] \tau^2 \right\}$$

Для любого j решение задачи можно записать следующим образом:

$$C_j^1 = (C_j^0 - C_{j+1}^0) \sum_{k=1}^j (w_k - w_1 C_j^0)$$

В данной работе мы ограничиваемся двумя первыми приближениями.

Второе слагаемое по отношению к первому выполняет роль поправки, то есть оно намного меньше первого. Разделив поправку на главное слагаемое, мы получаем, что должно быть:

$$\left| \frac{\varepsilon w_1 \tau e^{-\tau}}{e^{-\tau}} \right| = \varepsilon \tau |w_1| \ll 1,$$

Полученное неравенство нарушается только при достаточно больших значениях времени. Такое (поправочное) слагаемое называют секулярным. Разработаны методы улучшения разложений, содержащих такие слагаемые, к примеру, метод перенормировки [19, 20]. Тогда разложение имеет следующий вид:

$$C_1^1(\tau) = e^{-\tau(1+\varepsilon w_1)} + O(\varepsilon^2)$$

В действительности с точностью до слагаемых второго порядка имеем следующую картину:

$$\begin{aligned} e^{-\tau(1+\varepsilon w_1)} &= e^{-\tau} e^{-\tau \varepsilon w_1} = \\ &= e^{-\tau} \left[1 - \tau \varepsilon w_1 \right] + O(\varepsilon^2) \end{aligned}$$

Что совпадает с формулой (5). Формула пригодна и при $\tau = O(1/\varepsilon)$, но она становится не точной при дальнейшем возрастании времени. Однако в данной задаче, экспоненциальное слагаемое фактически является точным решением уравнения, поскольку секулярное слагаемое начинает проявлять себя, когда концентрация целевого вещества в первой ячейке становится практически нулевой.

4. Графическое изображение решения уравнений моделей ячейечной структуры потоков.

С помощью программы Mathcad попытаемся построить решение уравнений ячейечной структуры потоков, сравним это решение с графическими решениями, представленными в уже имеющихся учебниках по ПАХТу. Расчеты программы в среде Mathcad дают следующую картинку решения (рис. 2)

Мы ясно видим, что при увеличении числа ячеек, максимум функции сдвигается вправо, т.е. при бесконечном росте числа ячеек кривая стремится принять вид прямой (δ -функции) и при этом находится правее всех остальных максимумов, все это можно подтвердить расчетами. В ходе работы над статьей были замечены некоторые неточности в графических решениях этого уравнения в учебниках Гельперина и Фролова [2, 24]. Они неточно показывают смещение максимумов функции вправо. Можно предположить, что эти неточности возникли в ходе печати учебников.

На рисунке 2 представлена функция C_j с перенормированными переменными по осям координат (замена $\tau = nx$ в уравнении (4)):

$$J_n(x) = \exp(-nx) \frac{n^n x^{n-1}}{(n-1)!}. \quad (7)$$

Нормировка сделана таким образом, что площадь под любой кривой на интервале $(0, \infty)$ на рисунке 2 равна единице. Выражение (7) записано для последней n -ой ячейки. Оно, для нормировки, учитывает дополнительный множитель n , «связанный» с дифференциалом времени когда мы обращаемся к расчету площади под кривой через соответствующий интеграл.

Видим как по мере роста числа n кривая сжимается по оси абсцисс. В пределе $n \rightarrow \infty$ функция $J_n(x)$ стремится к δ -функции.

Рассмотрим еще одну задачу для ячейечной модели, хорошо подходящую для моделирования процесса промывки осадков. Представленные ниже решения (графики характерных функций) имеют качественные совпадения с экспериментальными кривыми промывки осадков. Подобрал число ячеек n можно добиться и количественного соответствия.

В данном случае мы будем решать задачу другим методом, а именно, найдем рекуррентную формулу для функциональной связи концентраций вещества в соседних ячейках.

Система уравнений ячейечной модели по-прежнему имеет вид (1): они дополняются начальными условиями для задачи промывки осадков (аппаратов и т.п.):

$$C_j(0) = 1, \quad j = 1, 2, 3, \dots, n. \quad (8)$$

Для промывки осадков жидкостью, не содержащей примеси должно быть $C_0 \equiv 0$.

При $j = 1$ решение задачи (1), (8) такое $C_1(\tau) = \exp(-\tau)$.

Удобно систему (1) представить следующим образом:

$$\frac{d}{d\tau} [\exp(\tau) C_j] = \exp(\tau) C_{j-1}, \quad C_j(0) = 1; \quad \Rightarrow$$

$$\exp(\tau) C_j = 1 + \int_0^\tau \exp(\xi) C_{j-1}(\xi) d\xi, \quad (9)$$

т.е. функции C_j могут последовательно ($j = 2, 3, \dots, n$) определяться из рекуррентного соотношения (9). Например, при $j = 2$ и $j = 3$ получаем:

$$\exp(\tau) C_2(\tau) = 1 + \int_0^\tau 1 d\xi = 1 + \tau,$$

$$\exp(\tau) C_3(\tau) = 1 + \int_0^\tau (1 + \xi) d\xi = 1 + \tau + \frac{\tau^2}{2}. \quad (10)$$

Отсюда можно предположить, что при любом j будем иметь:

$$\exp(\tau)C_j = 1 + \tau + \frac{\tau^2}{2} + \dots + \frac{\tau^{j-1}}{(j-1)!} + \frac{\tau^j}{j!} = \sum_{k=0}^j \frac{\tau^k}{k!} \quad (11)$$

Эту гипотезу можно обосновать при помощи рекуррентной формулы (9)

$$\begin{aligned} \exp(\tau)C_j &= 1 + \int_0^\tau \sum_{k=0}^{j-1} \frac{\xi^k}{k!} d\xi = \\ &= 1 + \sum_{k=0}^{j-1} \frac{\tau^{k+1}}{(k+1)!} = \sum_{k=0}^j \frac{\tau^k}{k!} \end{aligned} \quad (12)$$

т.е. формула (9) подтверждает гипотезу (11) согласно методу математической индукции.

Общее количество примесей в пористом теле определяется выражением

$$\begin{aligned} M &= \sum_{j=1}^n C_j(\tau)\rho V = \\ &= \rho V \exp(-\tau) \left\{ n + (n-1)\tau + (n-2)\frac{\tau^2}{2} + \dots + \frac{(n-j)\tau^j}{j!} + \frac{\tau^{n-1}}{(n-1)!} \right\} = \end{aligned} \quad (13)$$

$$= pW \exp(-\tau) \sum_{j=1}^{n-1} \left(1 - \frac{j}{n} \right) \frac{\tau^j}{j!}$$

где pW — полный объем ячеек, ρ — плотность примеси. Результаты расчетов по формулам (10-13) представлены на рисунке 3.

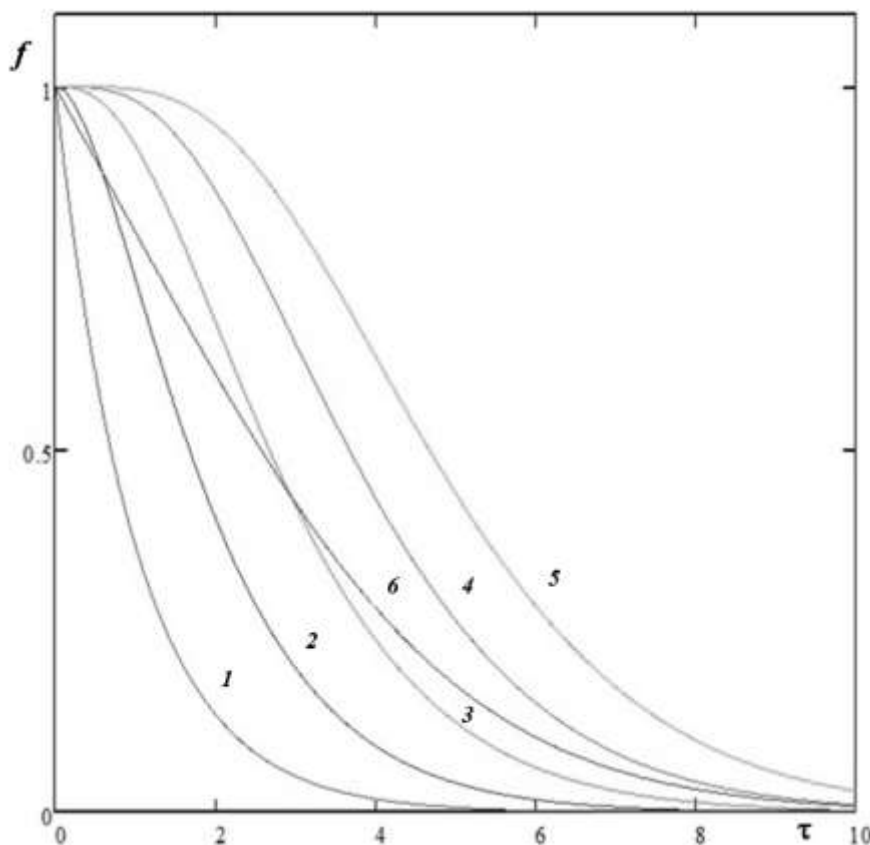


Рисунок 3 - Кривые промывки осадка. 1 – $f = C_1$, 2 – $f = C_2$; 3 – $f = C_3$; 4 – $f = C_4$; 5 – $f = C_5$; Полная масса примеси 6 – $f = M$

Figure 3 - Sludge washing curves. 1 – $f = C_1$, 2 – $f = C_2$; 3 – $f = C_3$; 4 – $f = C_4$; 5 – $f = C_5$; the total mass of the impurity 6 – $f = M$

Несколько слов об использовании различных моделей для описания структуры потоков в аппаратах химической технологии.

Существует несколько моделей описания

структуры потоков в аппарате: ячеечная, диффузионная, комбинированная, гидродинамическая и многие другие. Каждая из них весьма интересна для понимания процессов, проис-

ходящих внутри аппарата, для изучения изменения концентраций, температур, скоростей потока и многих других параметров. Все эти модели рисуют нам ясную картину самого процесса, они могут представить нам какой-то параметр очень глубоко, какой-то наиболее поверхностно, но в сумме они дополняют друг друга. Из всех упомянутых выше моделей наиболее простой для расчетов, наиболее распространенной и наиболее удобной является ячеечная модель структуры потоков. Для решения уравнений этой модели тоже используется несколько математических подходов. В частности, мы рассмотрели в данной работе метод малых возмущений, который также является довольно простым и распространенным.

В настоящее время мы отмечаем то, как важно уметь моделировать процессы, происходящие в химическом аппарате. С помощью ячеечной модели структуры потоков мы можем говорить не только о каскаде каких-то аппаратов, но и об одном аппарате в целом. При этом мы создаем какую-то конкретную модель, к примеру, изучаем закономерность изменения концентрации вещества по времени. Зная, определенные параметры системы, становится возможным четко проследить изменение этой концентрации, и в определенный момент остановить процесс. В фармацевтической промышленности это весьма важно, поскольку мы знаем, как чрезмерное влияние каких – либо параметров может изменить качество конечного продукта, качество самой субстанции или вспомогательных веществ. Все вышесказанное так или иначе ведет к негативному действию на организм человека. Ну и еще один немаловажный момент, при точном регулировании процесса можно говорить об экономической целесообразности модели.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Касаткин А.Г. Основные процессы и аппараты химической технологии, Москва, Альянс, 2004. 751 с.
2. Фролов В.Ф. Лекции по курсу процессы и аппараты химической технологии, Санкт-Петербург, химиздат, 2003. 608с.
3. Гельперин Н.И., Пибалк В.Л., Костанян А.Е. Структура потоков и эффективность колонных аппаратов химической промышленности, Москва, издательство «Химия», 1977. 364 с.
4. Кафаров В.В., Дорохов И.Н. Системный анализ процессов химической технологии. Основы стратегии. М.: Наука, 1976. 500 с.
5. Броунштейн Б.И., Щеголев В.В. Гидродинамика, массо- и теплообмен в колонных аппаратах. Л.: Химия, 1988. 336 с.
6. Мошинский А.И. Моделирование тепломассообменных процессов на основе обобщенных диффузионных уравнений. М.: Изд-во КНОРУС, 2019. 444 с.
7. Мошинский А.И. Диффузионная модель при наличии циркуляционных зон в аппаратах // Теор. основы хим. технол. 1988. Т. 22, № 3. С. 315 - 324.

8. Мошинский А.И. Некоторые вопросы теории ячеечных моделей // Теор. основы хим. технол. 1990. Т. 24, № 6. С. 743– 754.
9. Roemer M.H., Durbin L.D. Transient response and moments analysis of backflow cell model for flow system with longitudinal mixing // Ind. Engng. Chem. Fund. 1967. V. 6, N 1. P. 120– 129.
10. Buffham B.A., Gibilaro L.G. The analytical solution of the Deans - Levich model for dispersion in porous media // Chem. Engng. Sci. 1968. V. 23, N 11. P. 1399– 1401.
11. Мошинский А.И. Анализ ячеечной модели с обратным перемешиванием между ячейками и при наличии застойных зон // Теор. основы хим. технол. 1987. Т. 21, № 6. С. 732– 740.
12. Чуешов В.И. «Промышленная технология лекарственных», МТК-Книга; издательство НФАУ, 2002.
13. Кафаров В.В., Винаров А.Ю., Гордеев Л.С. Моделирование биохимических реакторов. Москва: Лесная промышленность, 1979. 344 с.
14. Романовский Ю.М., Степанова Н.В., Чернавский Д.С. Что такое математическая биофизика. (Кинетические модели в биофизике). М.: Просвещение, 1971. 136 с.
15. Пирсон Дж. Широкие горизонты гидромеханики // Современная гидродинамика. Успехи и проблемы. М.: Мир, 1984. С. 315– 336.
16. Бабенко Ю.И., Мошинский А.И. Операторные методы расчета ячеечных моделей химических аппаратов // Хим. промышленность. 1999. № 2. С. 102– 104.
17. Феллер В. Введение в теорию вероятностей и ее приложения. Т. 1. М.: Мир, 1967. 500 с.
18. Гардинер К.В. Стохастические методы в естественных науках. М.: Мир, 1986. 528 с.
19. Зорич В.А. Математический анализ, часть I, М: Наука, 1981. 544 с.
20. Коул Дж. Методы возмущений в прикладной математике. М.: Мир, 1972. 276 с.
21. Найфэ А. Введение в методы возмущений. М.: Мир, 1984. 535 с.
22. Найфэ А. Методы возмущений. М.: Мир, 1976. 456 с.
23. Ван-Дайк М. Методы возмущений в механике жидкости. М.: Мир, 1967. 312 с.
24. Гельперин Н.И. Основные процессы и аппараты химической технологии. Кн. 1. М.: Химия, 1981. 384 с.

Информация об авторах

Л. Ю. Александрова – преподаватель кафедры «Процессов и аппаратов химической технологии» Санкт-Петербургского государственного химико-фармацевтического университета.

П. Г. Ганин – кандидат технических наук, доцент кафедры «Процессов и аппаратов химической технологии» Санкт-Петербургского государственного химико-фармацевтического университета.

А. В. Маркова – кандидат технических наук, доцент кафедры «Процессов и аппаратов химической технологии» Санкт-Петербургского государственного химико-фармацевтического университета.

А. И. Мошинский – кандидат технических наук, доцент кафедры «Процессов и аппаратов химической технологии» Санкт-Петербургского государственного химико-фармацевтического университета.

Л. Н. Рубцова – кандидат фармацевтиче-

ИССЛЕДОВАНИЕ УРАВНЕНИЙ ЯЧЕЕЧНОЙ СТРУКТУРЫ ПОТОКОВ В ПРОЦЕССАХ И АППАРАТАХ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

ских наук, доцент кафедры «Процессов и аппаратов химической технологии» Санкт-Петербургского государственного химико-фармацевтического университета.

В. В. Сорокин – кандидат фармацевтических наук, доцент кафедры «Процессов и аппаратов химической технологии» Санкт-Петербургского государственного химико-фармацевтического университета.

REFERENCES

1. Kasatkin, A.G. (2004). *Basic processes and devices of chemical technology*. Moscow: Alliance. (In Russ.).
2. Frolov, V.F. (2003). *Lectures on the course of processes and apparatuses of chemical technology*. St. Petersburg: himizdat. (In Russ.).
3. Gelperin, N.I., Pebalk, V.L. & Kostyan, A.E. (1977). *Flow structure and efficiency of column apparatuses of chemical industry*. Moscow: publishing house "Chemistry". (In Russ.).
4. Kafarov, V.V. & Dorokhov, I.N. (1976). *System analysis of chemical technology processes. Fundamentals of strategy*. Moscow: Nauka. (In Russ.).
5. Brownstein, B.I. & Shchegolev, V.V. (1988). *Hydrodynamics, mass and heat transfer in column apparatuses*. L.: Chemistry. (In Russ.).
6. Moshinsky, A.I. (2019). *Modeling of heat and mass transfer processes based on generalized diffusion equations*. Moscow: KNORUS Publishing House. (In Russ.).
7. Moshinsky, A.I. (1988). Diffusion model in the presence of circulation zones in the apparatuses. *Theor. fundamentals of chemical technology*. 22(3). 315 – 324. (In Russ.).
8. Moshinsky A.I. (1990). Some questions of the theory of cellular models. *Theor. Fundamentals of chemical technology*. 24(6). 743 – 754. (In Russ.).
9. Roemer, M.H. & Durbin L.D. (1967). Transient response and moments analysis of backflow cell model for flow system with longitudinal mixing. *Ind. Engng. Chem. Fund.* 6(1). 120 – 129. (In Russ.).
10. Buffham, B.A. & Gibilaro, L.G. (1968). The analytical solution of the Deans - Levenspiel model for dispersion in porous media. *Chem. Engng. Sci.* 23(11). 1399 – 1401. (In Russ.).
11. Moshinsky, A.I. (1987). Analysis of a cellular model with reverse mixing between cells and in the presence of stagnant zones. *Theor. fundamentals of chemical technology*. 21(6), 732–740. (In Russ.).
12. Chueshov, V.I. (2002). *Industrial technology of medicines*. MTK-Book; publishing house NFAU. (In Russ.).
13. Kafarov, V.V., Vinarov, A.Yu. & Gordeev, L.S. (1979). *Modeling of biochemical reactors*. Moscow: Forest Industry. (In Russ.).
14. Romanovsky, Yu.M., Stepanova, N.V. & Chemavsky, D.S. (1971). *What is mathematical biophysics. (Kinetic models in biophysics)*. Moscow: Prosveshchenie. (In Russ.).

15. Pearson, J. (1984). *Broad horizons of hydromechanics. Modern hydrodynamics. Successes and problems*. M.: Mir, 315–336. (In Russ.).

16. Babenko, Yu.I., Moshinsky, A.I. (1999). Operational methods for calculating cellular models of chemical apparatuses. *Chemical industry*. (2), 102 – 104. (In Russ.).

17. Feller, V. (1967). *Introduction to the theory of probabilities and its applications*. Moscow: Mir. (In Russ.).

18. Gardiner, K.V. (1986). *Stochastic methods in natural sciences*. Moscow: Mir. (In Russ.).

19. Zorich, V.A. (1981). *Mathematical analysis, part I*. Moscow: Nauka. (In Russ.).

20. Cole, J. (1972). *Methods of perturbations in applied mathematics*. Moscow: Mir. (In Russ.).

21. Naife, A. (1984). *Introduction to perturbation methods*. Moscow: Mir. (In Russ.).

22. Naife, A. (1976). *Methods of perturbations*. M.: Mir. (In Russ.).

23. Van Dyke, M. (1967). *Methods of perturbations in fluid mechanics*. Moscow: Mir. (In Russ.).

24. Gelperin N.I. (1981). *Basic processes and devices of chemical technology*. M.: Chemistry. (In Russ.).

Information about the authors

L. Y. Alexandrova – lecturer of the Department of "Processes and Devices of Chemical Technology" of the St. Petersburg State Chemical and Pharmaceutical University.

P. G. Ganin – Candidate of Technical Sciences, Associate Professor of the Department of "Processes and Devices of Chemical Technology" of St. Petersburg State Chemical and Pharmaceutical University.

A. V. Markova – Candidate of Technical Sciences, Associate Professor of the Department of "Processes and Devices of Chemical Technology" of St. Petersburg State Chemical and Pharmaceutical University.

A. I. Moshinsky – Candidate of Technical Sciences Associate Professor of the Department of "Processes and Devices of Chemical Technology" of the St. Petersburg State Chemical and Pharmaceutical University.

L. N. Rubtsova – Candidate of Pharmaceutical Sciences, Associate Professor of the Department of "Processes and Applications of Chemical Technology" of St. Petersburg State Chemical and Pharmaceutical University.

V. V. Sorokin – Candidate of Pharmaceutical Sciences, Associate Professor of the Department of "Processes and Applications of Chemical Technology" of St. Petersburg State Chemical and Pharmaceutical University.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 14.06.2022; одобрена после рецензирования 25.07.2022; принята к публикации 15.08.2022.

The article was received by the editorial board on 14 June 2022 approved after editing on 25 July 2022; accepted for publication on 15 Aug 2022.