АКАДЕМИЯ НАУК СССР
НАУЧНЫЙ ЦЕНТР БИОЛОГИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ
НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЦЕНТР

ПРЕПРИНТ

С.А. АЗИЗОВ, А.М. МОЛЧАНОВ

ПРИМЕНЕНИЕ АСИМПТОТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ПРИ МАТЕМАТИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ БОЛЬШИХ РЕКТИФИКАЦИОННЫХ КОЛОНН

ПУЩИНО

1974

АКАДЕМИЯ НАУК СССР
НАУЧНЫЙ ЦЕНТР БИОЛОГИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ
НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЦЕНТР

ПРЕПРИНТ

С.А. АЗИЗОВ, А.М. МОЛЧАНОВ

ПРИМЕНЕНИЕ АСИМПТОТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ПРИ МАТЕМАТИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ БОЛЬШИХ РЕКТИФИКАЦИОННЫХ КОЛОНН

ПУЩИНО

1974

УДК. 621.391.66.048

Рассматриваются вопросы моделирования больших ректификационных колонн и обсуждаются трудности исследования и решения моделей, созданных по принципу "потарелочного моделирования". Показывается, что такие модели имеют неявно заданный малый параметр $\delta = \frac{1}{n}$, который возникает за счет большого числа тарелок. Применение теоремы Хинчина о сумматорных функциях позволяет этот малый параметр использовать для упрощения исходной модели. Предельный переход типа $n \to \infty$ дает асимптотические модели характерных участков колонны. Численным экспериментом показано, что с увеличением числа тарелок поведение колонны приближается к асимптотическому. Показано также, что для получения более точных количественных результатов необходимо учесть влияние граничных условий и числа тарелок.

Для моделирования тарельчатых ректификационных колонн в основном применяется принцип "потарелочного моделирования". Сущность такого подхода состоит в том, что для каждой тарелки пишется уравнение материального и теплового баланса в переходном режиме. Наиболее полная модель, построенная на таком принципе, приведена в работе /1/. В литературе используются также частные варианты такой модели, основанные на различных допущениях. Одно из таких допущений состоит в том, что гидродинамическое равновесие достигается гораздо быстрее, чем равновесие по массообмену. В этом случае модель тарельчатой колонны выглядит так:

$$
\begin{aligned}
&\frac{dx_i}{d\tau} = (\bar{L} + \sigma_i \bar{\Pi})(x_{i+1} - x_i) - \bar{K}(y_i^* - y_i) + \bar{\Pi}\sigma_i^*(x^{\Pi} - x_i) \\
&\varepsilon \frac{dy_i}{d\tau} = \bar{V}(y_{i-1} - y_i) + \bar{K}(y_i^* - y_i) \\
&y_i^* = \frac{dx_i}{1 + (\alpha - 1)x_i}; \quad \varepsilon = \frac{\ell_n}{\ell_{ж}}; \quad i = 1, \ldots, n; \\
&\sigma_i = \begin{cases} 1 & \text{если } i \leqslant f - 1 \\ 0, \end{cases} \qquad \sigma_i^* = \begin{cases} 1 & \text{если } i = f \\ 0, \end{cases} \\
&\bar{L} = L/\ell_{ж}; \quad \bar{\Pi} = \Pi/\ell_{ж}; \quad \bar{V} = V/\ell_{ж}; \quad \bar{K} = K/\ell_{ж};
\end{aligned}
\tag{1}
$$

где L – скорость флегмового потока, Π – скорость питающего потока, V – скорость пара, K – коэффициент массопередачи, $\ell_{ж}$ – количество жидкости на тарелке, ℓ_{Π} – количество пара на тарелке, α – коэффициент относительной летучести, x^{Π} – состав питающего потока, f – номер тарелки питания, x_i – концентрация легколетучего компонента в жидкой фазе i-ой тарелки, y_i – концентрация легколетучего компонента в паровой фазе i-й тарелки, ε – малый параметр (порядка 10^{-3} для атмосферных колонн), n – число тарелок в колонне (порядка 100–350 для больших колонн).

Система (1) имеет несколько явно выраженных малых параметров, которые позволяют, совершая предельные переходы, упростить модель каждой тарелки. В этом смысле возможны следующие предельные переходы: $\varepsilon \to 0$; $K \to \infty$, которые используются в работах /3–7/. В работе /2/ используется только $\varepsilon \to 0$. Рассмотрение стационарных режимов также связано с совершением предельного перехода $\tau \to \infty$. Как было отмечено выше, эти предельные переходы служат для упрощения модели каждой тарелки. Однако, поскольку в системе (1) остается принцип "потарелочного моделирования", для больших колонн система (1) имеет довольно высокий порядок, что затрудняет теоретическое исследование, порой даже численное интегрирование системы. В этом случае в системе (1) появляется неявно выраженный малый параметр ($\bar{\delta}$), который возникает за счет большого числа тарелок: $\bar{\delta} \sim \frac{1}{n}$.

В данной работе этот параметр используется для дальнейших упрощений исходной модели (1). Теоретической базой для такого подхода является теорема Хинчина о сумматорных функциях /8/. На основании общих идей Хинчина для исследуемой системы должна быть выбрана сумматорная функция H, характеризующая наиболее общие свойства системы. Для системы (1) таким показателем является общее количество легколетучего компонента в колонне:

$$E = \ell_{ж} \sum_{i=1}^{n} x_i + \ell_n \sum_{i=1}^{n} y_i . \tag{2}$$

Функция (2) является первым интегралом системы (1), если она замкнута, т.е. $П=0$; $D=0$; $W=0$, где D и W - скорости продуктов, отбираемых на дефлегматоре и кубе. Очевидно, что для незамкнутой системы при $n \to \infty$ функция (2) также будет первым интегралом. Поэтому в качестве функции H выбираем сумматорные функции, образующие первый интеграл (2) при $n \to \infty$:

$$\begin{aligned} H_1 &= \sum_{i=1}^{n} x_i , \\ H_2 &= \sum_{i=1}^{n} y_i . \end{aligned} \tag{3}$$

Функции (3) могут быть выбраны как для полной колонны, так и для отдельных секций. Определим поведения функций (3) для укрепляющей секции:

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{H}_1}{d\tau} &= \frac{1}{n_1} \bar{L}(x_D - x_{f+1}) - \frac{\bar{K}}{n_1} \sum_{i=f+1}^{n} (y_i^* - y_i) \\ \varepsilon \frac{d\bar{H}_2}{d\tau} &= \frac{1}{n_1} \bar{V}(y_f - y_n) + \frac{\bar{K}}{n_1} \sum_{i=f+1}^{n} (y_i^* - y_i) \\ \bar{H}_1 &= \frac{1}{n_1} \sum_{i=f+1}^{n} x_i ; \qquad \bar{H}_2 = \frac{1}{n_1} \sum_{i=f+1}^{n} y_i , \end{aligned} \tag{4}$$

где $n_1 = (n-f)$ - число тарелок в укрепляющей секции. Применив к правой части уравнений (4) теорему Хинчина, получим следующую систему:

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{x}}{d\tau} &= \frac{1}{n_1} \bar{L}(x_D - \bar{x}) - \bar{K}(\bar{y}^* - \bar{y}) \\ \varepsilon \frac{d\bar{y}}{d\tau} &= \frac{1}{n_1} \bar{V}(y_f - \bar{y}) + \bar{K}(\bar{y}^* - \bar{y}) \end{aligned} \tag{5}$$

$$\bar{x} = \overline{\frac{1}{n_1}\sum_{i=f+1}^{n} x_i} = \frac{\int_0^1 x e^{-\beta_1 x}\,dx}{\int_0^1 e^{-\beta_1 x}\,dx}$$

$$\bar{y} = \overline{\frac{1}{n_1}\sum_{i=f+1}^{n} y_i} = \frac{\int_0^1 y e^{-\beta_2 y}\,dy}{\int_0^1 e^{-\beta_2 y}\,dy} \qquad (5)$$

$$\bar{y}^* = \frac{\int_0^1 \frac{\alpha x}{1+(\alpha-1)x}\, e^{-\beta_1 x}\,dx}{\int_0^1 e^{-\beta_1 x}\,dx}.$$

Для исчерпывающей секции уравнение (5) выглядит так:

$$\frac{d\bar{\bar{x}}}{d\tau} = \frac{1}{n_2}(\bar{L}+\bar{\Pi})(x_f-\bar{\bar{x}}) - \bar{K}(\bar{\bar{y}}^*-\bar{\bar{y}})$$

$$\varepsilon\frac{d\bar{\bar{y}}}{d\tau} = \frac{1}{n_2}\bar{V}(y_0-\bar{\bar{y}}) + \bar{K}(\bar{\bar{y}}^*-\bar{\bar{y}}) \qquad (6)$$

$$\bar{\bar{x}} = \overline{\overline{\frac{1}{n_2}\sum_{i=1}^{f-1} x_i}}\,; \qquad \bar{\bar{y}} = \overline{\overline{\frac{1}{n_2}\sum_{i=1}^{f-1} y_i}}\,.$$

Второй член в правой части систем (5) и (6) был получен на основании предельного перехода $n \to \infty$. При этом, поскольку первый член имеет коэффициент $\frac{1}{n}$, он обращается в нуль. Тогда системы (5) и (6) превращаются в одну систему:

$$\frac{d\bar{x}}{d\tau} = -\bar{K}(\bar{y}^*-\bar{y})$$

$$\varepsilon\frac{d\bar{y}}{d\tau} = \bar{K}(\bar{y}^*-\bar{y}). \qquad (7)$$

Система (7) имеет первый интеграл, равный:

$$\mathcal{J} = \ell_{ж}\,\bar{x} + \ell_{п}\,\bar{y}. \qquad (8)$$

Из этого следует, что при $n \to \infty$ легколетучий компонент со средним количеством $\mathcal{J}$ сохраняется постоянным в колонне. Значение $\mathcal{J}$ вычисляется по начальным данным следующим образом:

$$\mathcal{J} = \frac{\ell_{ж}}{n} \sum_{i+1}^{n} x_i(0) + \frac{\ell_п}{n} \sum_{i=1}^{n} y_i(0). \tag{9}$$

Из системы (7) ясно, что она одинакова как для полной колонны, так и для отдельных секций. Для выяснения области применения системы (7) была решена система (1) для различного числа тарелок. В результате решения было выяснено поведение переменного $\mathcal{J}$ для полной колонны, а также для укрепляющей секции, и результаты были сравнены с поведением $\mathcal{J}$ при $n \to \infty$. Были выбраны одинаковые начальные данные для всех тарелок, равные 0,5. Результаты исследования представлены на рис. 1. Сравнение кривых показывает, что для полной колонны с увеличением числа тарелок поведение $\mathcal{J}$ приближается к асимптотической линии (1) и остается постоянным по времени. Однако для укрепляющей секции заданное количество легколетучего компонента не остается постоянным и увеличивается с течением времени (ясно, что для исчерпывающей секции оно будет уменьшаться). Даже поведение $\mathcal{J}$ для укрепляющей секции при $n_1 = 50$ (кривая 4) заметно отличается от поведения $\mathcal{J}$ для полной колонны при $n = 30$ (кривая 3). Таким образом, можно сделать вывод, что система (7) описывает поведение глобальных переменных $\bar{x}$ и $\bar{y}$ для полной колонны при больших n.

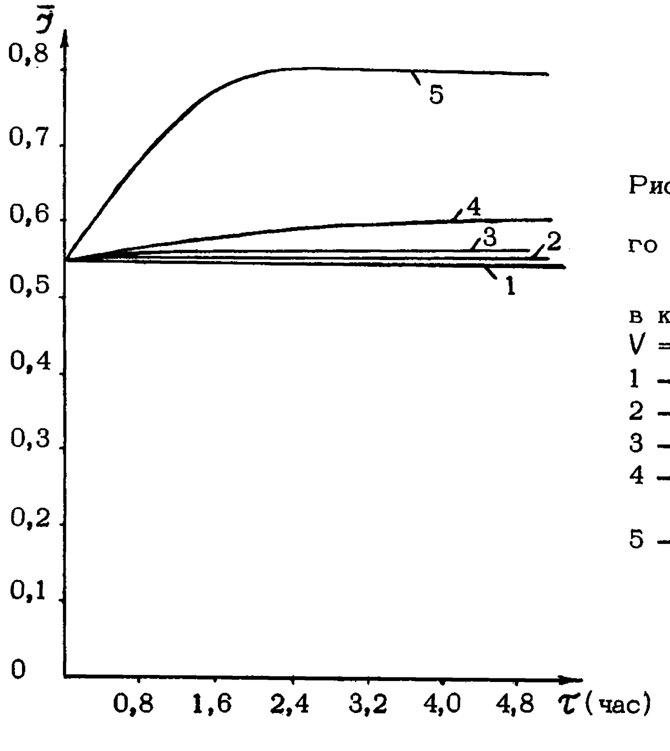

Рис. 1. Сравнение изменения легколетучего компонента $\left(\bar{\mathcal{J}} = \frac{1}{n}\left(\sum_{i=1}^{n} x_i + \mathcal{E}\sum_{i=1}^{n} y_i\right)\right)$

в колонне ($П = 10000$; $x^П = 0{,}5$; $L = 8680$; $V = 13780$; $K = 14300$; $\ell_{ж} = 200$; $\ell_п = 20$).

1 – асимптотическая линия при $n \to \infty$,
2 – для полной колонны ($n = 100$; $\alpha = 1{,}8$),
3 – для полной колонны ($n = 30$; $\alpha = 2{,}46$),
4 – для укрепляющей секции ($n = 100$; $n_1 = 50$; $\alpha = 1{,}8$),
5 – для укрепляющей секции ($n = 30$; $n_1 = 15$; $\alpha = 2{,}46$).

Эти переменные в пространстве переменных выделяют поверхности, на которых осуществляется осреднение поведения тарелок колонны. Поведение отдельных тарелок на этой поверхности может быть определено при помощи расщепленной системы. Суть расщепления состоит в том, что в модели каждой тарелки переменные соседних тарелок осредняются на пересечении поверхностей $\bar{x}$ и $\bar{y}$. Выбирая функции H для отдельных секций колонны, напишем асимптотические модели наиболее характерных участков колонны.

Асимптотическая модель верхней части колонны:

$$
\begin{aligned}
&\frac{dx_D}{d\tau} = (V/\ell_D)(y_n - x_D)\\
&\frac{dx_n}{d\tau} = \bar{L}(x_D - x_n) - \bar{K}(y_n^* - y_n)\\
&\varepsilon\frac{dy_n}{d\tau} = \bar{V}(y_{n-1} - y_n) + \bar{K}(y_n^* - y_n)\\
&\frac{d\bar{x}}{d\tau} = -\bar{K}(\bar{y}^* - \bar{y})\\
&\varepsilon\frac{d\bar{y}}{d\tau} = K(\bar{y}^* - \bar{y})\\
&y_{n-1} = \bar{y}.
\end{aligned}
\qquad (10)
$$

Начальные данные для переменных $\bar{x}$ и $\bar{y}$ определяются следующим образом:

$$
\begin{aligned}
&\bar{y}(0) = y_{n-1}(0)\\
&\bar{x}(0) = \frac{\mathcal{I} - \ell_п\bar{y}(0)}{\ell_ж},
\end{aligned}
$$

где $\mathcal{I} = \ell_ж\bar{x}(\infty) + \ell_п\bar{y}(\infty)$, $\bar{y}(\infty) = y_{n-1}(\infty)$,

$\bar{x}(\infty)$ вычисляется из формулы $\bar{y}^*(\infty) = \bar{y}(\infty)$.

Асимптотическая модель тарелки питания:

$$
\begin{aligned}
&\frac{dx_i}{d\tau} = (\bar{L} + \sigma_i\bar{П})(x_{i+1} - x_i) - \bar{K}(y_i^* - y_i) + \bar{П}\sigma_i^*(x^П - x_i)\\
&\varepsilon\frac{dy_i}{d\tau} = \bar{V}(y_{i-1} - y_i) + \bar{K}(y_i^* - y_i)\\
&\frac{d\bar{x}}{d\tau} = -\bar{K}(\bar{y}^* - \bar{y})\\
&\varepsilon\frac{d\bar{y}}{d\tau} = \bar{K}(\bar{y}^* - \bar{y})\\
&\frac{d\bar{\bar{x}}}{d\tau} = -\bar{K}(\bar{\bar{y}}^* - \bar{\bar{y}})\\
&\varepsilon\frac{d\bar{\bar{y}}}{d\tau} = \bar{K}(\bar{\bar{y}}^* - \bar{\bar{y}})\\
&x_{i+2} = \bar{x}\\
&y_{i-2} = \bar{\bar{y}}\\
&i = f-1,\ f,\ f+1.\\
&\bar{\bar{x}}(0) = \frac{\mathcal{I}_2 - \ell_п\bar{\bar{y}}(0)}{\ell_ж}
\end{aligned}
\qquad (11)
$$

$$\mathcal{I}_2 = \ell_{ж} \bar{\bar{x}}(\infty) + \ell_п \bar{\bar{y}}(\infty)$$

$$\begin{aligned}
&\bar{\bar{y}}(0) = y_{i-2}(0)\\
&\bar{x}(0) = x_{i+2}(0)\\
&\bar{y}(0) = \frac{\mathcal{I}_1 - \ell_{ж}\bar{x}(0)}{\ell_п}\\
&\mathcal{I}_1 = \ell_{ж}\bar{x}(\infty) + \ell_п \bar{y}(\infty).
\end{aligned} \tag{11}$$

Асимптотическая модель нижней части колонны:

$$\begin{aligned}
&\frac{dx_1}{d\tau} = (\bar{L} + \bar{П})(x_2 - x_1) - \bar{K}(y_1^* - y_1)\\
&\varepsilon\frac{dy_1}{d\tau} = \bar{V}(y_0 - y_1) + \bar{K}(y_1^* - y_1)\\
&\frac{dx_0}{d\tau} = \left(\frac{L+П}{\ell_0}\right)x_1 - \left(\frac{W}{\ell_0}\right)x_0 - \left(\frac{V}{\ell_0}\right)y_0^*\\
&\frac{d\bar{\bar{x}}}{d\tau} = -\bar{K}(\bar{\bar{y}}^* - \bar{\bar{y}})\\
&\varepsilon\frac{d\bar{\bar{y}}}{d\tau} = K(\bar{\bar{y}}^* - \bar{\bar{y}})\\
&x_2 = \bar{\bar{x}}; \quad y_0 = y_0^*\\
&\bar{\bar{x}}(0) = x_2(0)\\
&\bar{\bar{y}}(0) = \frac{\mathcal{I} - \ell_{ж}\bar{\bar{x}}(0)}{\ell_п}\\
&\mathcal{I} = \ell_{ж}\bar{\bar{x}}(\infty) + \ell_п\bar{\bar{y}}(\infty).
\end{aligned} \tag{12}$$

Из полученных асимптотических моделей ясно, что при $n \to \infty$ исходная модель (1) распадается на отдельные подсистемы, которые имеют довольно низкий порядок и решаются самостоятельно. Это показывает, что с увеличением числа тарелок в колонне связь между крайними участками колонны ослабляется, а при $n \to \infty$ вообще прекращается. Для получения более точных количественных результатов при конечном n эти связи должны быть учтены. Для этого в асимптотических моделях вместо системы (7) должны быть использованы системы (5) или (6), в которых учитывается заданное количество тарелок и влияние граничных условий (переменные дефлегматора, тарелки питания и куба). Численные расчеты показывают, что с учетом граничных условий даже при не очень больших n для функций H получаются достаточно хорошие приближения (рис. 2). Очевидно, что с увеличением n получится еще более точное приближение.

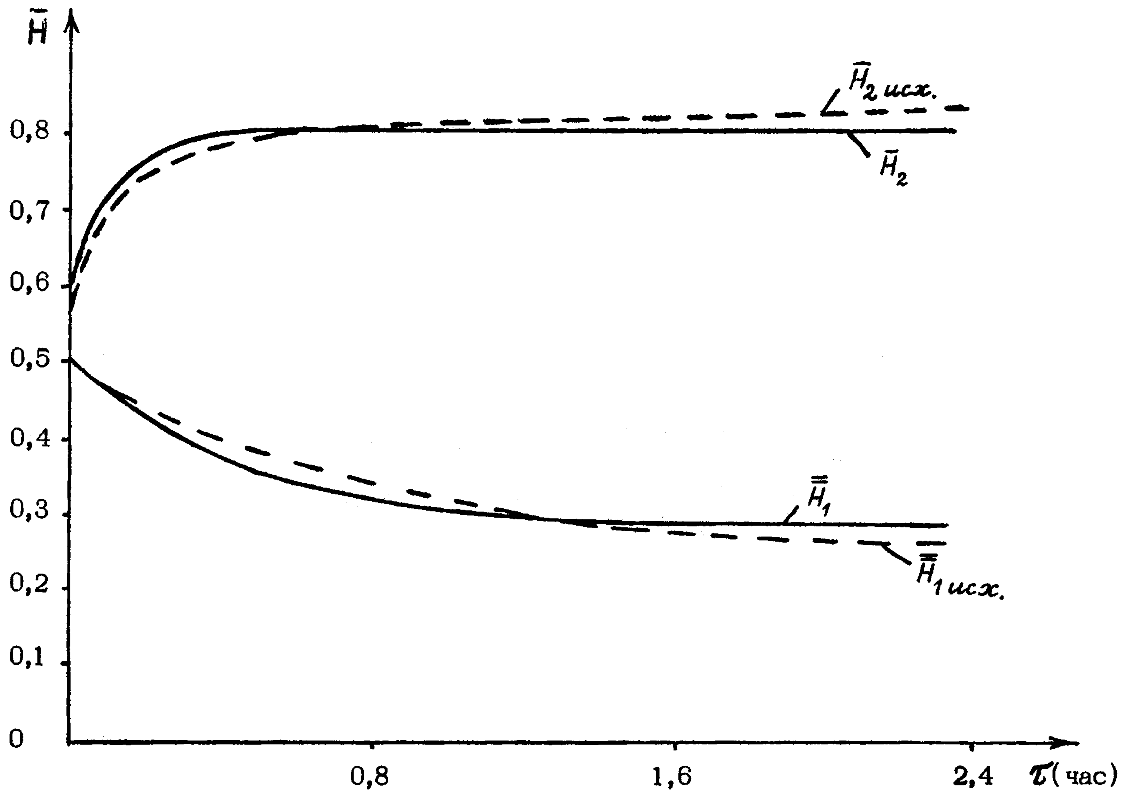

Рис. 2. Сравнение поведений функции $\bar{H}$ для укрепляющей и исчерпывающей секции с учетом граничных условий ($П = 10000$; $x^П = 0,5$; $L = 8680$; $V = 13780$; $K = 14300$; $\ell_{ж} = 200$; $\ell_{п} = 20$; $n = 30$; $f = 15$; $\alpha = 2,46$).

Таким образом, большое число тарелок осложняет исходную модель (1). Но с другой стороны предельный переход $n \to \infty$ дает возможность применить асимптотические методы и получить более простые системы. Эти системы не только качественно отражают поведение исходной модели, но с учетом граничных условий позволяют получить более точные количественные результаты.

В заключение выражаем глубокую благодарность З.А.Искендер-заде и Н.С.Али-заде, принимавшим активное участие при обсуждении результатов, и М.А.Топчибашеву за оказанное внимание и поддержку в работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Али-заде Н.С., Атакишиева М.К., Искендер-заде З.А. Материалы II-го Всесоюзного симпозиума "Проблемы системотехники", 7-9 июня 1972 г. Изд-во "Судостроение", 1972, стр. 5.
2. Анисимов И.В. Труды II-го Международного конгресса ИФАК, т.IУ. М., "Наука", 1965, стр. 265.
3. Burman L.K., Maddox R.N., Process design and development, 8, 4 433 (1969).
4. Кембелл Д.П. Динамика процессов химической технологии. М., изд-во ГХИ, 1962.
5. Изава К., Моринга Т. Труды II-го Международного конгресса ИФАК, т.IУ. М., "Наука", 1965, стр. 293.
6. Rosenbrock H.H., Trans. Inst. Engr., 38 (1960).
7. Чарльз Д., Холланд. Многокомпонентная ректификация. М., изд-во "Химия", 1969.
8. Молчанов А.М. Об одной теореме А.Я.Хинчина (препринт). ИПМ АН СССР, М., 1968.

С.А.Азизов, А.М.Молчанов

ПРИМЕНЕНИЕ АСИМПТОТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ПРИ МАТЕМАТИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ БОЛЬШИХ РЕКТИФИКАЦИОННЫХ КОЛОНН

Отредактировано и подготовлено к печати
в Отделе научно-технической информации

Редактор Е.С.Бражникова

Т-18781 Подписано в печать 12/XI-1974 г. Уч.-изд. л. 1.0
Тираж 150 экз. Заказ 2161 Р.

Отпечатано на ротапринте в ОНТИ Научного центра биологических исследований АН СССР в Пущине.