

В. П. МАЙКОВ, член-корреспондент АН СССР Н. М. КАРАВАЕВ

## ТЕОРЕТИКО-ИНФОРМАЦИОННАЯ КОНЦЕПЦИЯ ДВИЖУЩИХ СИЛ В ПРОЦЕССАХ РАЗДЕЛЕНИЯ

Рассмотрим первоначально разделение бинарных смесей.

Неупорядоченность одного моля потока, состоящего из двух компонентов с мольными концентрациями  $y$  и  $1-y$ , может измеряться информационной энтропией (энтропия выбора)

$$H(y) = -y \log y - (1-y) \log (1-y).$$

Если  $y=0$  или  $y=1$ , неупорядоченность потока минимальна (полностью упорядоченный поток, функция  $H(y)=0$ ). Если  $y=0,5$ , неупорядоченность потока максимальна (упорядоченность минимальна, при использовании двоичных логарифмов функция  $H(y)=1$ ).

В процессах разделения, где участвуют два потока, снижение неупорядоченности одного из них (обрабатываемый поток), как правило, сопровождается повышением неупорядоченности другого (обрабатывающий поток)\*. Обозначим концентрации компонентов в обрабатываемом потоке  $y$  и  $1-y$ , а в обрабатывающем —  $x$  и  $1-x$ . Тогда приращение упорядоченности одного моля обрабатываемого потока  $dI_y$  на элементе высоты аппарата  $dh$  можно представить выражением, записанным по аналогии с уравнением массоотдачи

$$dI_y = s_y [H^0(y) - H^0(y_{rp})] dh, \quad (1)$$

где  $H^0(y)$  — неупорядоченность ядра обрабатываемого потока, отсчитанная от равновесного состояния с концентрацией  $y^*$

$$H^0(y) = H(y) - H(y^*),$$

$H^0(y_{rp})$  — то же на границе раздела фаз;  $s_y$  — коэффициент пропорциональности.

Соотношение (1), записанное через обрабатывающий поток, имеет вид

$$dI_y = s_x [H^0(x_{rp}) - H^0(x)] dh, \quad (2)$$

где  $H^0(x) = H(x) - H(x^*)$ ;  $H^0(x_{rp})$  — то же на границе раздела фаз.

Нетрудно видеть, что функция  $H^0$  выполняет роль потенциала. Учтывая, что на границе раздела фаз не может быть скачкообразного изменения потенциала и, следовательно,  $H^0(y_{rp}) = H^0(x_{rp})$ , из выражения (1) и (2) можно получить

$$dI_y = \frac{1}{1/s_y + 1/s_x} [H^0(y) - H^0(x)] dh. \quad (3)$$

Значение функции  $H^0$  положительно, если неупорядоченность обрабатываемого потока понижается, и отрицательно, если неупорядоченность обрабатывающего потока повышается. Изменение знака функции  $H^0$  мо-

\* Исключение составляют режимы на небольшом участке ректификационных колонн, где  $x < 0,5$  при  $y > 0,5$ . Ввиду краткости изложения особенности этих режимов в статье не рассматриваются.

жет произойти только на границе между фазами. Таким образом,

$$H^0(y_{гр}) = H^0(x_{гр}) = 0. \quad (4)$$

Равенство (4), в свою очередь, выполнимо лишь при условии, если на границе раздела фаз достигается равновесие. Заметим, что в существующих моделях массопередачи условие равновесия на границе раздела фаз приходится вводить в качестве дополнительного постулата.

Коэффициенты  $s_y$  и  $s_x$  выполняют роль характеристик интенсивности процесса. Однако они не являются независимыми, поскольку условия (4) приводят с учетом (1) и (2) к соотношению

$$s_x = s_y H^0(y) / H^0(x). \quad (5)$$

Подставляя это выражение в (3) и интегрируя, получим

$$hs_y = \int_{y_0}^{y_1} \frac{dI_y}{\Delta H(y)}, \quad (6)$$

где  $\Delta H(y) = H(y) - H(y^*)$ . Интеграл в правой части назовем числом энтропийных единиц разделения (по аналогии с числом единиц переноса массы) и обозначим  $S_y$ , тогда  $s_y = S_y/h$ . Таким образом, коэффициент  $s_y$  есть число энтропийных единиц разделения, приходящихся на единицу высоты аппарата.

Процедура использования выражения (6) для расчета массообменных аппаратов такая же, как использование чисел единиц переноса массы. В частности, для интервала концентраций, где можно принять линейную зависимость между движущей силой и неупорядоченностью потока, уравнение (6) с учетом неэквиволярного обмена примет вид

$$I_y = s_y h \Delta H_{ср},$$

где

$$I_y = H(y_0) - \frac{V_1}{V_0} H(y_1), \quad \Delta H_{ср} = [\Delta H(y_0) - \Delta H(y_1)] / \ln \frac{\Delta H(y_0)}{\Delta H(y_1)}, \quad (7)$$

$V_0, V_1$  — расход обрабатываемого потока в начальном и конечном сечении (кмол.);  $I_y$  — устраненная неупорядоченность обрабатываемого потока (количество информации).

Записав исходное выражение для всего обрабатываемого потока  $V_0$  (кмол/сек)

$$V_0 dI_y = b_y [H^0(y) - H^0(y_{гр})] f dh, \quad (8)$$

аналогично можно получить

$$I_y = b_y \frac{hf}{V_0} \Delta H_{ср},$$

где  $f$  — поперечное сечение аппарата, м<sup>2</sup>.

Здесь коэффициент  $b_y$  выражает количество устраняемой неупорядоченности обрабатываемого потока в единице объема аппарата за единицу времени при движущей силе, равной единице. Движущая сила может выражаться в битах информации.

Все зависимости получены для обрабатываемого потока, которыми будет либо паровой (газовый) поток, либо жидкостной (индексы  $y$  в формулах можно заменить на  $x$ ).

Понижение неупорядоченности потока в общем случае не совпадает с широко принятым понятием обогащения потока тем или иным компонентом. Так, обогащение пара легколетучим компонентом в интервале концентраций 0—0,5, в силу особенности функции  $H(y)$ , должно означать повышение неупорядоченности (обрабатываемый поток), а в интервале 0,5—1,0 — понижение неупорядоченности (обрабатываемый поток).

При абсорбции обрабатывается газовый (паровой) поток, при десорбции — жидкостной. В двухсекционной ректификационной колонне все или значительная часть тарелок верхней (нижней) секции работают в режиме обработки парового (жидкостного) потока.

На рис. 1 показано изменение движущих сил как разности неупорядоченностей потока в зависимости от состава смеси. Здесь же для сравнения дан график изменения движущих сил как разности концентраций. Из графиков видно качественное различие этих концепций.

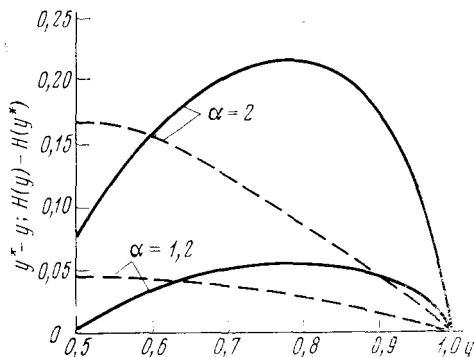


Рис. 1

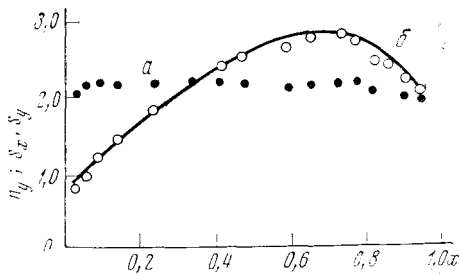


Рис. 2

Рис. 1. Характер изменения движущих сил от состава бинарной смеси. Сплошные линии — движущая сила как разность информационных энтропий, пунктирные — как разность концентраций.  $\alpha$  — относительная летучесть

Рис. 2. Зависимость параметров  $n_y$  и  $s_y$ ,  $s_x$  от состава смеси  $\text{CCl}_4 - \text{C}_6\text{H}_5\text{CN}$ , при ректификации в режиме полного возврата флегмы; а — обработка с использованием чисел единиц переноса массы (<sup>1</sup>); б — то же с использованием энтропийных единиц разделения ( $\alpha=2,6$ )

На рис. 2 показано характерное изменение чисел единиц переноса массы, отнесенных к единице высоты аппарата ( $n_y$ ) от состава смеси при неизменных гидродинамической обстановке и относительной летучести компонентов (смесь выбрана близкой к идеальной). Экспериментальные данные заимствованы из работы (<sup>1</sup>). Зависимость носит экстремальный характер. Из этой же работы следует, что значения частных коэффициентов массоотдачи также существенно связаны с концентрациями компонентов в смеси. Обработка тех же экспериментальных данных в энтропийных единицах разделения  $s_x$  (для  $0 < x < 0,5$ ) и  $s_y$  (для  $0,5 < x < 1$ ) обнаруживает инвариантность этих параметров (в пределах погрешности эксперимента) относительно состава смеси при постоянной относительной летучести компонентов.

Прежде чем перейти к обобщению рассматриваемого подхода на случай разделения многокомпонентных смесей, необходимо дополнительно остановиться на некоторых особенностях используемых движущих сил.

В обсуждаемой концепции под движущей силой понимается разность величин, соответствующая уменьшению, а не возрастанию энтропии. Такое толкование, тем не менее, не противоречит второму закону термодинамики. Согласно этому закону, повышение энтропии связывается с участием всех частей системы, в которых имели место какие-либо изменения в ходе процесса, в то время как в отдельных частях энтропия может понижаться. Такое локальное понижение энтропии столь же вероятно, как ее общее повышение. Иначе говоря, глобальные движущие силы, направленные на возрастание неупорядоченности, неизбежно порождают локальные движущие силы, направленные на создание порядка (упорядоченности). Понятие упорядоченности отражает разнообразие элементов по некоторому определенному признаку. Этих признаков у одного и того же объекта может быть несколько. При этом упорядоченность по одному признаку не

всегда будет совпадать с упорядоченностью по другому признаку, что может приводить в ряде случаев к неоднозначной связи между информационной и термодинамической энтропией <sup>(2)</sup>. Однако последнее обстоятельство не должно вызывать недоумения, поскольку в этом проявляется более широкий характер понятия информационной энтропии как меры неупорядоченности по сравнению с аналогичным понятием в термодинамике.

Если в качестве основного признака различия компонентов в многокомпонентном потоке принять их физические свойства, то

$$H(y_1, y_2, \dots, y_m) = - \sum_1^m y_i \log y_i, \quad (9)$$

где  $y_i$  — концентрация  $i$ -го компонента в потоке (м.д.).

Учитывая, что все компоненты  $i = 1, 2, \dots, m$  обладают разными свойствами, имеем  $m$  признаков различия.

Если же в качестве признака различия выбрать принадлежность компонента к группе легких или тяжелых компонентов для данного разделения, то

$$H(\bar{y}) = -\bar{y} \log \bar{y} - (1-\bar{y}) \log (1-\bar{y}), \quad (10)$$

где  $\bar{y}$  — сумма концентраций компонентов, принадлежащих к группе легких (м.д.).

Различие компонентов проводится здесь только по двум признакам.

Выбор признака различия, а следовательно, и характеристики упорядоченности, очевидно, необходимо увязывать с основным функциональным назначением системы. Например, эффективность технической системы удобней всего выражать в терминах той неупорядоченности, снижение (повышение) которой является основной целью системы. То же относится и к движущей силе — последователя систем очень часто может интересоваться не движущая сила процесса вообще (в термодинамическом смысле), а движущая сила, направленная на определенный вид упорядоченности (в информационном смысле).

Поскольку любое элементарное массообменное устройство делит многокомпонентную смесь только на группу легких и тяжелых компонентов, то для выражения движущих сил при многокомпонентной ректификации следует принять определение неупорядоченности в виде соотношения (10), а не (9). Косвенным подтверждением этого могут служить результаты <sup>(3)</sup>, где показано, что оптимальное значение отбора дистиллята (кубового продукта) зависит только от суммы легких (тяжелых) компонентов в питании и практически не зависит от распределения компонентов внутри этих групп.

Характер изменения движущих сил по высоте массообменного аппарата при использовании оценки неупорядоченности потока в виде (10) сохраняется таким же, как и для бинарных смесей.

Объединение легких и тяжелых компонентов в отдельные группы здесь не имеет ничего общего с приемом упрощенного расчета «по разделяемой паре». В данном случае объединение производится лишь в связи с интерпретацией движущих сил процесса. Однако расчет равновесных концентраций в соответствующих сечениях аппарата должен осуществляться с учетом индивидуальных свойств каждого компонента.

Московский институт химического  
машиностроения

Поступило  
3 IX 1974

#### ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

<sup>1</sup> H. Sawistowski, W. Smith, Ind. and Eng. Chem., v. 51, № 8, 915 (1959). <sup>2</sup> М. Н. Матвеев, Вестн. Московск. ун-та, Философия, № 4, 36 (1973). <sup>3</sup> А. В. Гальцов, В. П. Майков, Теор. основы хим. технол., т. 7, № 2, 170 (1973).