

Член-корреспондент АН СССР В. В. КАФАРОВ, В. В. ШЕСТОПАЛОВ,
А. В. АНИСИМОВ

ОБ ОДНОМ ПОДХОДЕ К РАСЧЕТУ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ С ОБРАТНЫМИ ПОТОКАМИ

При численном расчете цепочек аппаратов, охваченных рециркулирующими потоками, возникают трудности вычислительного характера, связанные с введением итерационных процедур по обратным потокам. При этом приходится исследовать сходимость итерационного процесса и разрабатывать специальные приемы, которые должны обеспечить сходимость, если она не имеет места. Кроме того, при численном расчете схемы приходится иметь дело с задачей большой размерности, так как в этом случае уравнения материального и теплового балансов содержат как зависимые, так и независимые переменные. Разделение переменных на зависимые и независимые представляет собой достаточно громоздкую процедуру⁽¹⁾, результат которой не всегда облегчает построение вычислительного алгоритма.

Если имеются аналитические решения для отдельных аппаратов, то задачи анализа химико-технологических систем можно решать без итерационных процедур. Этот подход позволяет получить корректные решения рассматриваемых задач и значительно уменьшает затраты машинного времени, что особенно существенно при решении задач оптимизации.

Для примера рассмотрим абсорбционно-десорбционную установку, схема которой приведена на рис. 1. Схема состоит из реактора для проведения реакции типа $A \rightarrow B$, абсорбционной колонны, предназначенной для поглощения продукта реакции B и десорбционной колонны, в которой происходит регенерация абсорбента.

Для упрощения математических выкладок и большей наглядности принимаем, что процесс протекает при следующих допущениях:

1. Условия в каждом из аппаратов изотермические.
2. В реакторе режим идеального перемешивания.
3. В колоннах потоки движутся в режиме идеального вытеснения.
4. Потоки газа и жидкости постоянны по высоте колонны.
5. Линии равновесия в обеих колоннах линейны. $y^* = mx$.
6. Компонент A нерастворим в абсорбенте. Система уравнений материального баланса имеет вид:

$$G_0 y_{A0} + r y_{A2} - (G_0 + r) y_{A1} - V_1 k y_{A1} = 0, \quad (1)$$

$$r y_{B2} - (G_0 + r) y_{B1} + V_1 k y_{A1} = 0; \quad (2)$$

$$\frac{dy_B}{dz_1} + \frac{K_{0r2} a_2 V_2}{G_0 + r} (y_B - m x_B) = 0; \quad (3)$$

$$\frac{dx_B}{dz_1} + \frac{K_{0r2} a_2 V_2}{L} (y_B - m x_B) = 0; \quad (4)$$

$$\frac{dy_B}{dz_2} + \frac{K_{0r3} a_3 V_3}{G_1} (y_B - m_1 x_B) = 0; \quad (5)$$

$$\frac{dx_B}{dz_2} + \frac{K_{0r3} a_3 V_3}{L} (y_B - m_1 x_B) = 0, \quad (6)$$

где G — поток газа; L — поток жидкости; r — рециркулирующий поток газа; y — концентрация в газовой фазе; x — концентрация в жидкой фазе; k — константа скорости реакции; V_1, V_2, V_3 — объемы аппаратов; $K_{0r2}a_2$, $K_{0r3}a_3$ — объемные коэффициенты массопередачи; m, m_1 — тангенс угла

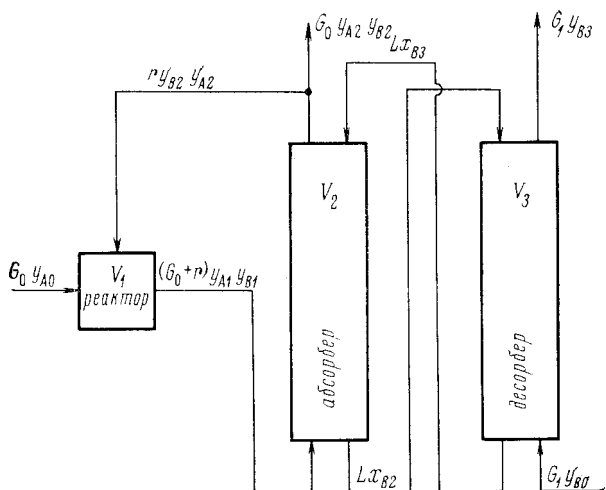


Рис. 1

наклона равновесных линий; z_1, z_2 — безразмерные координаты по высоте абсорбера и десорбера.

С учетом граничных условий:

$$z_1=0, y_B=y_{B1}; \quad z_1=1, x_B=x_{B3};$$

$$z_2=0, y_B^*=y_{B0}=0; \quad z_2=1, x_B^*=x_{B2};$$

решения уравнений (3) — (6) для концентраций на концах колонн имеют вид:

$$z_1=1 \quad y_{B3} = \frac{y_{B1}e^{-Q}[m(G_0+r)-L]+x_{B3}mL[e^{-Q}-1]}{m(G_0+r)e^{-Q}-L}; \quad (7)$$

$$z_1=0 \quad x_{B1} = \frac{y_{B1}(G_0+r)[e^{-Q}-1]+x_{B3}[m(G_0+r)-L]}{m(G_0+r)e^{-Q}-L}; \quad (8)$$

$$z_2=1 \quad y_{B3} = \frac{m_1Lx_{B2}}{m_1G_1e^{-R}-L}(e^{-R}-1); \quad (9)$$

$$z_2=0 \quad x_{B3} = \frac{x_{B2}}{m_1G_1e^{-R}-L}(m_1G_1-L), \quad (10)$$

где

$$Q = \frac{K_{0r2}a_2V_2[L-m(G_0+r)]}{(G_0+r)L}; \quad R = \frac{K_{0r3}a_3V_3(L-m_1G_1)}{G_1L}.$$

Введем обозначения: $e^{-Q}[m(G_0+r)-L]=M$; $mL(e^{-Q}-1)=N$; $m(G_0+r)e^{-Q}-L=S$; $(G_0+r)(e^{-Q}-1)=T$; $m(G_0+r)-L=P$; $m_1L(e^{-R}-1)=U$; $m_1G_1e^{-R}-L=$

$-L=H$; $m_1 G_1 - L = J$, тогда уравнения (7) — (10) переписутся в виде:

$$y_{B2} = \frac{y_{B1}M + x_{B3}N}{S}; \quad (11)$$

$$x_{B2} = \frac{y_{B1}T + x_{B3}P}{S}; \quad (12)$$

$$y_{B3} = \frac{x_{B2}U}{H}; \quad (13)$$

$$x_{B3} = \frac{x_{B2}J}{H}. \quad (14)$$

Подставляя (14) в (12), найдем

$$x_{B2} = y_{B1} \frac{HT}{SH - JP},$$

тогда

$$y_{B3} = y_{B1} \frac{UT}{SH - JP}; \quad (15)$$

$$y_{B2} = y_{B1} \frac{M(SH - JP) + JNT}{S(SH - JP)}. \quad (16)$$

Определим y_{B1} из уравнения (2) с учетом (16)

$$y_{B1} = \frac{V_1 k y_{A1}}{(G_0 + r) - r \frac{M(SH - JP) + JNT}{S(SH - JP)}}.$$

Из уравнения (1) определим y_{A1} , учитывая, что $y_{A1} = y_{A2}$:

$$y_{A1} = \frac{G_0 y_{A0}}{G_0 + V_1 k}.$$

Тогда для потоков, покидающих систему, имеем:

$$y_{B3} = \frac{UT}{SH - JP} \frac{G_0 y_{A0} V_1 k}{(G_0 + V_1 k) \left[(G_0 + r) - r \frac{M(SH - JP) + JNT}{S(SH - JP)} \right]}; \quad (17)$$

$$y_{B2} = \frac{M(SH - JP) + JNT}{S(SH - JP)} \frac{G_0 y_{A0} V_1 k}{(G_0 + V_1 k) \left[(G_0 + r) - r \frac{M(SH - JP) + JNT}{S(SH - JP)} \right]}; \quad (18)$$

$$y_{A2} = \frac{G_0 y_{A0}}{G_0 + V_1 k}. \quad (19)$$

Выражения (17) — (19) содержат только свободные переменные, из которых можно составить критерий оптимальности, и, используя его, найти значения этих переменных, соответствующие оптимуму.

Рассмотренный метод можно использовать и для более сложных моделей отдельных аппаратов.

Московский химико-технологический институт
им. Д. И. Менделеева

Поступило
28 III 1975

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

¹ В. В. Кафаров, В. Л. Перов, В. П. Мешалкин, Принципы математического моделирования химико-технологических систем, М., «Химия», 1974.