

**БЪЛГАРСКА АКАДЕМИЯ НА НАУКИТЕ
ИНСТИТУТ ПО ИНЖЕНЕРНА ХИМИЯ**

Боян Христов Бояджиев

**КОМПЮТЪРНО МОДЕЛИРАНЕ НА
ПРОЦЕСИ В КОЛОННИ АПАРАТИ**

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т

**на дисертационен труд,
за присъждане на образователна и научна степен „ДОКТОР”**

**Научна специалност: 4.2 Химически науки
”Процеси и апарати в химичната и биохимичната технология”**

Научен ръководител: доц. д-р Мария Дойчинова

София, 2018 г.

ВЪВЕДЕНИЕ

Моделирането е основен подход за количествено описание на промишлените процеси за целите на тяхното оптимално проектиране и управление. То се състои от една логична последователност от дейности (операции):

1. Физично описание на механизма на един сложен процес като съвкупност от прости процеси (физични ефекти) и техните взаимодействия.
2. Математично описание на физичния механизъм на процеса като съвкупност от математични оператори и връзките между тях под формата на уравнения.
3. Създаване на числени компютърни алгоритми за решаване на уравненията на математичното описание, поради невъзможността да се използват аналитични решения на уравненията.
4. Теоретичен анализ на математичното описание, с цел определяне на необходимите експериментални данни и начините за тяхното получаване, за целите на определянето на параметрите в математичното описание.
5. Получаване на експериментални данни за целите на параметричната идентификация.
6. Изчисляване на параметрите в математичното описание посредством минимизиране на функцията на най-малките квадрати, т.е. стойностите на параметрите, при които сумата от квадратите на разликите между изчислените и експерименталните стойности на величините е минимална.
7. Проверка на адекватността на модела, при която дисперсията на грешката на модела не надхвърля дисперсията на грешката на експерименталните данни, използвани за определяне на параметрите.
8. Моделът е готов и може да се използва за симулиране на промишления процес.

От горния теоретичен анализ се вижда, че създаването на числени компютърни алгоритми (т. 3) за решаване на уравненията на математичното описание е възлов момент при количествено описание на промишлените процеси, тъй като те се използват за изчисляване на функцията на най-малките квадрати (т. 6) и за симулирането на промишления процес (т. 8).

Създаване на числени компютърни алгоритми за решаване на уравненията на математичното описание е възможно след създаването на математичното описание на физичния механизъм на процеса. Математичното описание на промишлените процесите в колонните апарати се прави на базата на теорията масопренасянето, чието съвременно състояние е предмет на литературния обзор.

Направеният литературен обзор показва, че класическата теория на масопренасянето не може да описва промишлените процеси в колонните апарати поради това, че разпределението на скоростите във фазите и междуфазните граници са неизвестни и не могат да бъдат определени практически. Създадените нов тип модели на процесите в колонни апарати [10, 11] заобикалят тези проблеми замествайки повърхностните реакции на междуфазните граници с обемни реакции във фазите, а неизвестните разпределения на скоростите във фазите – със средните скорости. Предлаганите конвективно-дифузионни модели позволяват качествен анализ на процесите, докато новите модели на средните концентрации правят количествено описание на процесите. Разглежданите процеси в колонните апарати са хомогенни химични реакции, химична и физична абсорбция в правоточни и противоточни колони, химична и физична адсорбция, хетерогенни каталитични реакции с химичен и физичен адсорбционен механизъм [10, 11].

Предлаганите нови модели на процесите в колонни апарати съдържат системи от диференциални уравнения, повечето от които не могат да бъдат решавани посредством съществуващите алгоритми и е необходимо създаването на подходящи алгоритми и програми, които ще бъдат предмет на настоящата дисертация.

ЦЕЛ И ЗАДАЧИ

Целта на дисертацията е създаването на подходящи методи и алгоритми за решаване на конвективно-дифузионни модели, позволяващи качествен анализ на процесите, а използвайки модели на средните концентрации - количествено описание на процесите. Процесите, които ще бъдат разгледани в колонните апарати са хомогенни химични реакции, химична и физична абсорбция в правоточни и противоточни колони, химична и физична адсорбция, хетерогенни каталитични реакции с химичен и физичен адсорбционен механизъм. Ще бъдат решени следните проблеми:

1. Основен проблем във всички модели на колонните апарати е наличието на малък параметър пред старшата производна. В тези случаи уравненията нямат точни решения и трябва да се използва метода на пертурбациите с подходящ алгоритъм и програма за интерполация при последователното решаване на уравненията в системата.
2. Основен проблем в случаите на противоточни абсорбционни процеси е появата на отрицателен Лапласиан, което налага едновременното използване на две

координатни системи. В тези случаи трябва да се използва подходящ итеративен алгоритъм и програма с интерполационни процедури.

3. Основен проблем при дълготрайни адсорбционни процеси е, че времето е параметър в частта от модела за газовата фаза, докато аксиалните и радиалните координатите са параметри в частта от модела за твърдата фаза. В тези случаи трябва да се използва итеративен многостъпков алгоритъм и програма, където стъпката ще бъде кратък интервал от време.
4. Основен проблем при стационарни хетерогенни каталитични процеси е, че моделите представляват системи от диференциални и функционални уравнения. В тези случаи трябва да се използва итеративен многостъпков алгоритъм и програма, където стъпката ще бъде кратък интервал от аксиалната координата.
5. Основен проблем в модела на средните концентрации е влиянието на радиалната нееднородност на скоростта. Новите алгоритми и програми, за решаване на уравненията в моделите на конвекция-дифузия, позволяват да бъде определено това влияние и средно-концентрационните модели да бъдат представени като двупараметрични модели, където параметрите могат да бъдат получени с използване на експериментални данни.
6. Основни проблеми в случаите на определяне на параметрите в модела и симулирането на промишлени процеси са намирането на решенията на уравненията в средно-концентрационните модели. В тези случаи ще бъдат използвани новите компютърни алгоритми и програми.
7. Новите компютърни алгоритми и програми ще бъдат използвани за създаването на нови патенти и за моделиране и симулиране на процесите в тези нови патенти.

Глава 1. Подход на метода на пертурбациите

Диференциалните уравнения в конвективно-дифузионните модели и моделите на средните концентрации, в случаите на не много високи колони, съдържат малък параметър пред старшата производна. В тези случаи уравненията нямат точни решения и трябва да се търсят приближени решения с метода на смущенията в комбинация с подходящи интерполационни алгоритми. Като пример ще бъде разгледана хомогенна химична реакция от псевдо-първи порядък. В този случай конвективно-дифузионният и средно-концентрационният модели в обобщени променливи имат вида:

$$U \frac{\partial C}{\partial Z} = \text{Fo} \left(\varepsilon \frac{\partial^2 C}{\partial Z^2} + \frac{1}{R} \frac{\partial C}{\partial R} + \frac{\partial^2 C}{\partial R^2} \right) - \text{Da} C;$$

$$R = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial R} \equiv 0; \quad R = 1, \quad \frac{\partial C}{\partial R} \equiv 0;$$

$$Z = 0, \quad C \equiv 1, \quad 1 \equiv U - \text{Pe}^{-1} \frac{\partial C}{\partial Z},$$

$$B(Z) \frac{d\bar{C}}{dZ} + \frac{dB}{dZ} \bar{C} = \text{Pe}^{-1} \frac{d^2 \bar{C}}{dZ^2} - \text{Da} \bar{C};$$

$$Z = 0, \quad \bar{C} = 1, \quad \frac{d\bar{C}}{dZ} = 0;$$

където Fo, Pe и Da са числата на Фурие, Пекле и Дамкьолер, съответно:

$$\text{Fo} = \frac{Dl}{u^0 r_0^2}, \quad \text{Pe} = \frac{\bar{u}l}{D}, \quad \text{Da} = \frac{kl}{\bar{u}}, \quad \varepsilon = \left(\frac{r_0}{l} \right)^2.$$

Като пример ще бъде представен случаят на параболично разпределение на скоростта (поток на Поазьол):

$$u = \bar{u} \left(2 - 2 \frac{r^2}{r_0^2} \right), \quad \bar{u} = u^0, \quad U(R) = 2 - 2R^2.$$

От (3) можем да получим $\text{Pe}^{-1} = \theta = \varepsilon \text{Fo}$. При всички видове процеси в колонните апарати практически $\text{Fo} \leq 1$ и за високите колони $0 = \varepsilon \leq 10^{-2}$, $0 = \theta \leq 10^{-2}$, т.е. в (1, 2) може да се положи $\varepsilon = \theta = 0$. При ниски колони $10^{-2} < \varepsilon < 0.3$, $10^{-2} < \theta < 0.3$, т.е. ε и θ са малки параметри пред старшите производни в (1, 2). При тези условия тези задачи нямат точни решения и трябва да се намерят приближени решения с метода на пертурбациите, т.е. да се търсят решения в ред по степените на малките параметри.

Решението на (1) при $\varepsilon < 0.3$ ($\varepsilon^4 < 10^{-2}$) може да използва следното приближение на метода на пертурбациите:

$$C(R, Z) = C^{(0)}(R, Z) + \varepsilon C^{(1)}(R, Z) + \varepsilon^2 C^{(2)}(R, Z) + \varepsilon^3 C^{(3)}(R, Z),$$

където $C^{(0)}, C^{(s)}$, $s = 1, 2, 3$ са решения на следната система:

$$(2 - 2R^2) \frac{\partial C^{(0)}}{\partial Z} = \text{Fo} \left(\frac{1}{R} \frac{\partial C^{(0)}}{\partial R} + \frac{\partial^2 C^{(0)}}{\partial R^2} \right) - \text{Da} C^{(0)};$$

$$R = 0, \quad \frac{\partial C^{(0)}}{\partial R} = 0; \quad R = 1, \quad \frac{\partial C^{(0)}}{\partial R} = 0; \quad Z = 0, \quad C^{(0)} = 1.$$

$$(2-2R^2)\frac{\partial C^{(s)}}{\partial Z} = \text{Fo}\left(\frac{1}{R}\frac{\partial C^{(s)}}{\partial R} + \frac{\partial^2 C^{(s)}}{\partial R^2}\right) - \text{Da}C^{(s)} + \text{Fo}\frac{\partial^2 C^{(s-1)}}{\partial Z^2};$$

$$R=0, \quad \frac{\partial C^{(s)}}{\partial R} = 0; \quad R=1, \quad \frac{\partial C^{(s)}}{\partial R} = 0; \quad Z=0, \quad C^{(s)} = 0, \quad s=1, \dots, 3.$$
(7)

За решаването на системата (6, 7) не могат да се използват известни алгоритми и е необходимо включването на подходящ алгоритъм. За целта решението на (6, 7) ползва многостъпкова изчислителна процедура в комбинация с интерполационни процедури, където функциите $C^{(s)}(R, Z)$, $s=0, 1, 2, 3$, ще бъдат получени в 4 матрични форми:

$$C^{(s)}(R, Z) = \|a_{\rho\zeta}^s\|, \quad s=0, 1, 2, 3, \quad \rho=1, 2, \dots, \rho^0, \quad \zeta=1, 2, \dots, \zeta^0,$$

$$0 \leq R \leq 1, \quad 0 \leq Z \leq 1, \quad R = \frac{\rho-1}{\rho^0-1}, \quad Z = \frac{\zeta-1}{\zeta^0-1}, \quad \rho^0 = \zeta^0.$$
(8)

Първата стъпка е решаването на (6), т.е. изчисляване на елементите на матрицата:

$$C^{(0)}(R, Z) = \|a_{\rho\zeta}^0\|, \quad \rho=1, 2, \dots, \rho^0, \quad \zeta=1, 2, \dots, \zeta^0,$$

$$0 \leq R \leq 1, \quad 0 \leq Z \leq 1, \quad R = \frac{\rho-1}{\rho^0-1}, \quad Z = \frac{\zeta-1}{\zeta^0-1}, \quad \rho^0 = \zeta^0.$$
(9)

Следващата стъпка е полиномната интерполация на функцията $C^{(0)}(R, Z)$:

$$C^{(0)}(R, Z) = \|a_{\rho\zeta}^0\| = |\alpha_{0\rho}^0| + |\alpha_{1\rho}^0|Z + |\alpha_{2\rho}^0|Z^2 + |\alpha_{3\rho}^0|Z^3 + |\alpha_{4\rho}^0|Z^4,$$

$$\rho=1, 2, \dots, \rho^0, \quad 0 \leq R \leq 1, \quad R = \frac{\rho-1}{\rho^0-1},$$
(10)

и определянето на втората производна

$$\frac{\partial^2 C^{(0)}}{\partial Z^2} = \|g_{\rho\zeta}^0\| = 2|\alpha_{2\rho}^0| + 6|\alpha_{3\rho}^0|Z + 12|\alpha_{4\rho}^0|Z^2,$$

$$\rho=1, 2, \dots, \rho^0, \quad 0 \leq R \leq 1, \quad R = \frac{\rho-1}{\rho^0-1}.$$
(11)

Следващите стъпки са последователните (първо $s=1$ и след това $s=2$) решения на (7) за $s=1, 2$, т.е. изчисляване на елементите на матриците:

$$C^{(s)}(R, Z) = \|a_{\rho\zeta}^s\|, \quad \rho=1, 2, \dots, \rho^0, \quad \zeta=1, 2, \dots, \zeta^0,$$

$$0 \leq R \leq 1, \quad 0 \leq Z \leq 1, \quad R = \frac{\rho-1}{\rho^0-1}, \quad Z = \frac{\zeta-1}{\zeta^0-1}, \quad \rho^0 = \zeta^0, \quad s=1, 2,$$
(12)

полиномните апроксимации (интерполации) на функциите $C^{(s)}(R, Z)$, $s=1, 2$

$$C^{(s)}(R, Z) = \|a_{\rho\zeta}^s\| = |\alpha_{0\rho}^s| + |\alpha_{1\rho}^s|Z + |\alpha_{2\rho}^s|Z^2 + |\alpha_{3\rho}^s|Z^3 + |\alpha_{4\rho}^s|Z^4,$$

$$\rho=1, 2, \dots, \rho^0, \quad 0 \leq R \leq 1, \quad R = \frac{\rho-1}{\rho^0-1}, \quad s=1, 2$$
(13)

и определяне на вторите производни

$$\frac{\partial^2 C^{(s)}}{\partial Z^2} = \|g_{\rho\zeta}^s\| = 2|\alpha_{2\rho}^s| + 6|\alpha_{3\rho}^s|Z + 12|\alpha_{4\rho}^s|Z^2, \quad (14)$$

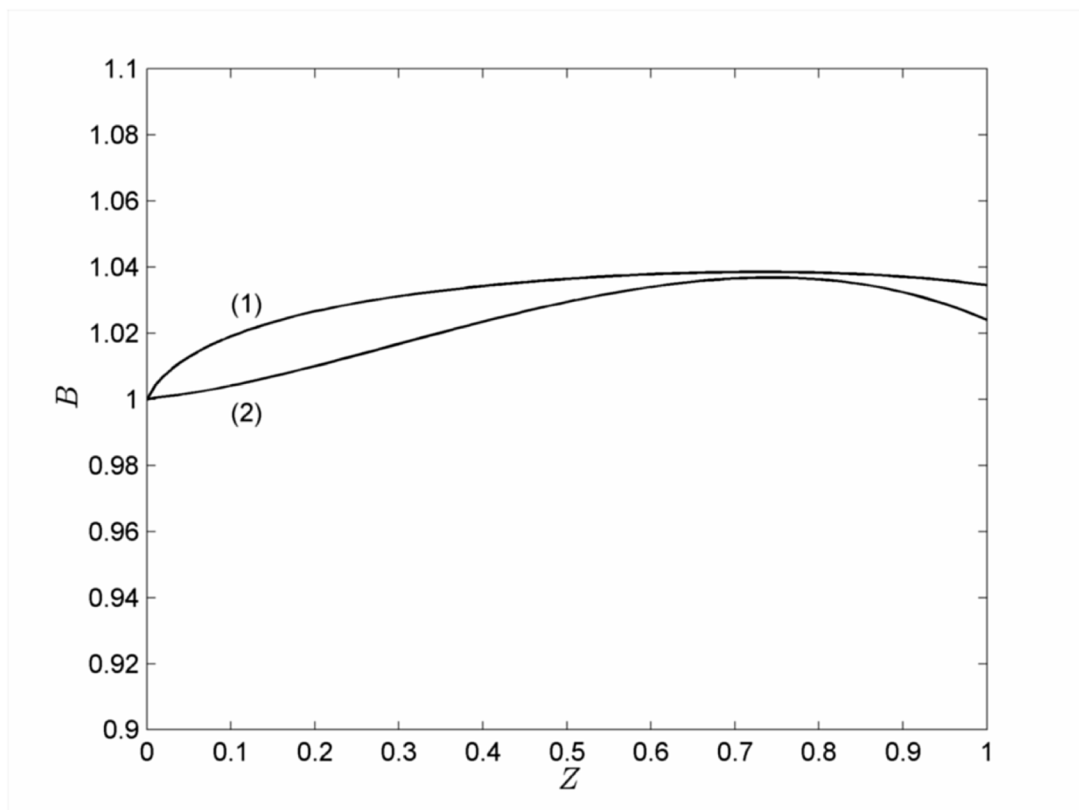
$$\rho = 1, 2, \dots, \rho^0, \quad 0 \leq R \leq 1, \quad R = \frac{\rho-1}{\rho^0-1}, \quad s = 1, 2.$$

Последната стъпка е решаването на (7) за $s = 3$.

Решението на проблема (1) беше получено с използването на програма на MATLAB. Решават се уравнения (6, 7), използвайки MATLAB функцията `рдере`, която решава частни диференциални уравнения. Вторите производни $\frac{\partial^2 C^{(s)}}{\partial Z^2}$, $s = 0, 1, 2$ са получени чрез полиномна апроксимация, използвайки MATLAB функциите `polyfit` и `polyder2` и след това са въведени в частните диференциални уравнения, използвайки MATLAB функцията `interp2`.

Решението на (1) позволява определянето на функциите $\bar{C}(Z)$, $B = B(Z)$:

$$B(Z) = 2 \int_0^1 R(2 - 2R^2) \frac{C(R, Z)}{\bar{C}(Z)} dR, \quad \bar{C}(Z) = 2 \int_0^1 RC(R, Z) dR \quad (15)$$



Фиг. 1. Функция $B(Z)$: (1) $\varepsilon = 0.1$, (2) $\varepsilon = 0.3$.

На Фиг.1 е показана функцията $B = B(Z)$ за случаите $Fo = 0.5$, $Da = 1$, $\varepsilon = 0.1, 0.3$, $Pe^{-1} = \varepsilon Fo = 0.05, 0.15$. От Фиг. 1 се вижда, че функцията $B(Z)$ е възможно да се представи чрез линейна апроксимация $B = b_0 + b_1 Z$ и стойности на параметрите b_0, b_1 ($\varepsilon = 0.1, 0.3$), за случаите $Fo = 0.5$, $Da = 1$, $\varepsilon = 0.1, 0.3$, $Pe^{-1} = \varepsilon Fo = 0.05, 0.15$, са представени в Табл. 1.

Таблица 1. Стойности на моделните параметри.

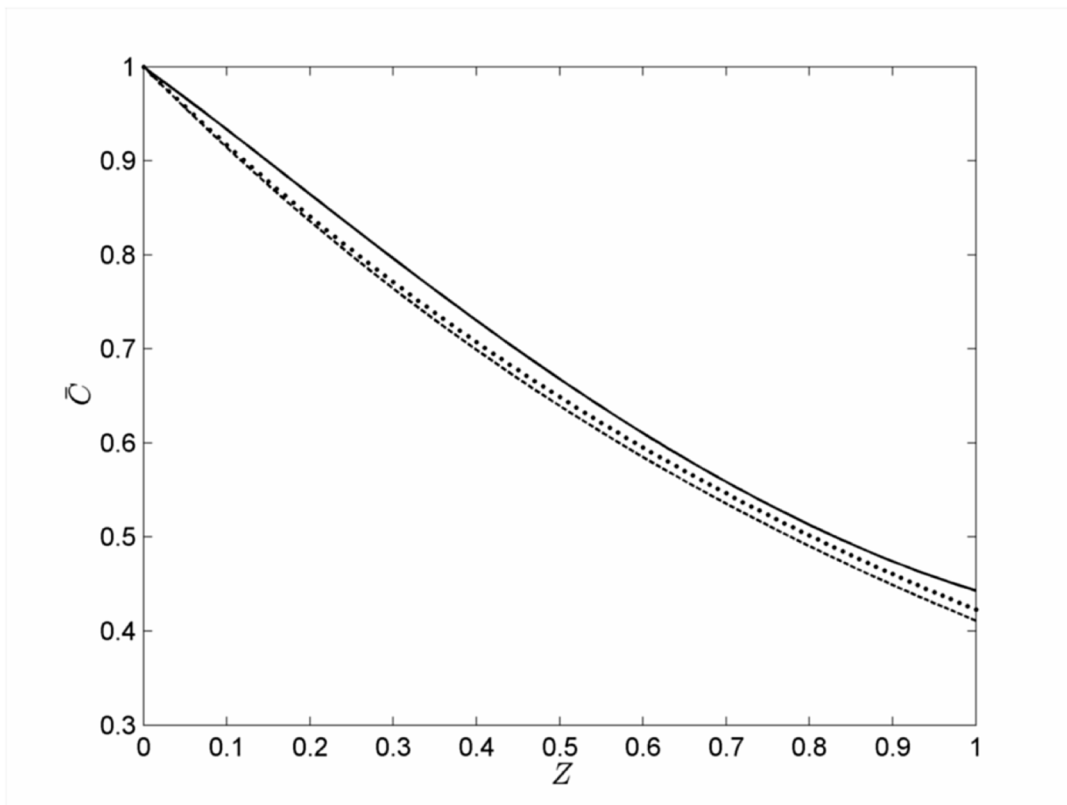
ε	b_0	b_1
0.1	1,0126	0,0075
0.3	0,9937	0,0288

В резултат моделът (2) добива вида:

$$(b_0 + b_1 Z) \frac{d\bar{C}}{dZ} + b_1 \bar{C} = Pe^{-1} \frac{d^2 \bar{C}}{dZ^2} - Da \bar{C};$$

$$Z = 0, \quad \bar{C}(0) \equiv 1, \quad \left(\frac{d\bar{C}}{dZ} \right)_{Z=0} \equiv 0. \quad (16)$$

В (16), за случая $Fo = 0.5$, $Da = 1$, $\varepsilon = 0.3$, малкият параметър е $Pe^{-1} = \varepsilon Fo = \theta = 0.15$, $\theta^3 < 10^{-2}$, т.е. може да се използва следното приближение на метода пертурбациите:



Фиг. 2. Средни концентрации за $\theta = 0.15$: Плътна линия – изчислени чрез (15), многоточие- решение на(18, 19) (алгоритъм 1), пунктир – решение на (18, 19) (алгоритъм 2).

$$\bar{C} = \bar{C}^{(0)} + \theta \bar{C}^{(1)} + \theta^2 \bar{C}^{(2)} \quad (17)$$

и от (32) и (33) се получава:

$$(b_0 + b_1 Z) \frac{d\bar{C}^{(0)}}{dZ} + b_1 \bar{C}^{(0)} = -Da \bar{C}^{(0)}; \quad Z = 0, \quad \bar{C}^{(0)}(0) = 1. \quad (18)$$

$$(b_0 + b_1 Z) \frac{d\bar{C}^{(s)}}{dZ} + b_1 \bar{C}^{(s)} = \frac{d^2 \bar{C}^{(s-1)}}{dZ^2} - Da \bar{C}^{(s)}; \quad Z = 0, \quad \bar{C}^{(s)}(0) = 0, \quad s = 1, 2. \quad (19)$$

Решението на системата (18, 19) се прави аналогично на (6, 7) с многостъпков алгоритъм. Един друг алгоритъм използва уравнение (2) за изчисляване на втората производна. Решенията на (16) със стойностите на параметрите b_0, b_1 (Табл. 1) и $\theta = 0.15, Da = 1$, получени с двата алгоритъма са представени на Фиг. 2, където са сравнени със средните концентрации, изчислени чрез (15).

Изводи

Компютърното моделиране и симулиране на процесите на масопренасяне в колонни апарати на базата на новия подход, с помощта на конвективно-дифузионни и средно-концентрационни модели води до проблема за решаване на диференциални уравнения с малък параметър пред старшата производна. Този проблем е решен от три алгоритми, като се използва метода на пертурбациите. Предложените метод, алгоритми и програми са основа за представянето на средно-концентрационния модел като двупараметричен, за определянето на параметрите в него и за симулиране на химични процеси в промишлени колонни апарати [3]

Глава 2. Модел в две координатни системи

Противоточната абсорбция има отрицателна средна скорост на течната фаза, т.е. числата на Фурие, Пекле и Лапласианът са отрицателни и задачата няма решение. Това налага използването на две координатни системи с противно насочени аксиални координати и конвективно-дифузионният и средно-концентрационният модели в обобщени променливи имат вида:

$$\begin{aligned}
U_1(R) \frac{\partial C_1}{\partial Z_1} &= \text{Fo}_{11} \left(\varepsilon \frac{\partial^2 C_1}{\partial Z_1^2} + \frac{1}{R} \frac{\partial C_1}{\partial R} + \frac{\partial^2 C_1}{\partial R^2} \right) - K_0 (C_1 - C_2); \\
U_2(R) \frac{\partial C_2}{\partial Z_2} &= \text{Fo}_{12} \left(\varepsilon \frac{\partial^2 C_2}{\partial Z_2^2} + \frac{1}{R} \frac{\partial C_2}{\partial R} + \frac{\partial^2 C_2}{\partial R^2} \right) + K_0 \frac{u_1^0 \chi}{u_2^0} (C_1 - C_2); \\
R=0, \quad \frac{\partial C_j}{\partial R} &\equiv 0; \quad R=1, \quad \frac{\partial C_j}{\partial R} \equiv 0; \quad j=1,2; \\
Z_1=0, \quad C_1 &\equiv 1, \quad 1 \equiv U_1(R) - \text{Pe}_{11}^{-1} \left(\frac{\partial C_1}{\partial Z_1} \right)_{Z_1=0}; \\
Z_2=0, \quad C_2 &\equiv 0, \quad \left(\frac{\partial C_2}{\partial Z_2} \right)_{Z_2=0} \equiv 0; \\
K_0 &= \frac{k_0 l}{u_1^0}, \quad \text{Fo}_{1j} = \frac{D_{1j} l}{u_j^0 r_0^2}, \quad \text{Pe}_{11} = \frac{u_1^0 l}{D_{11}}, \quad j=1,2.
\end{aligned} \tag{20}$$

$$\begin{aligned}
A_j \frac{d\bar{C}_j}{dZ_j} + \frac{dA_j}{dZ_j} \bar{C}_j &= \text{Pe}_j^{-1} \frac{d^2 \bar{C}_j}{dZ_j^2} - (-1)^{j-1} K_{0j} (\bar{C}_1 - \bar{C}_2); \quad j=1,2; \\
Z_1=0, \quad \bar{C}_1 &= 1, \quad \left(\frac{d\bar{C}_1}{dZ_1} \right)_{Z_1=0} = 0; \quad Z_2=0, \quad \bar{C}_2 = 0, \quad \left(\frac{d\bar{C}_2}{dZ_2} \right)_{Z_2=0} = 0; \\
\text{Pe}_j &= \frac{\bar{u}_j l}{D_j}, \quad K_{0j} = \frac{k_0 l}{\bar{u}_j} \chi^{j-1}, \quad j=1,2.
\end{aligned} \tag{21}$$

При получаването на (21) са използвани изразите:

$$\bar{C}_j(Z) = 2 \int_0^1 R C_j(R, Z) dR, \quad A_j(Z) = 2 \int_0^1 R U_j(R) \frac{C_j(R, Z)}{\bar{C}_j(Z)} dR, \quad j=1,2. \tag{22}$$

Като пример ще се използва параболично разпределение на скоростта (поток на Поазьол), където разликата между фазовите скорости е само в средните скорости:

$$U_1 = U_2 = 2 - 2R^2. \tag{23}$$

В случаите на физична абсорбция, във висока ($\varepsilon = 0$) противоточна двуфазна колона, междуфазното масопренасяне се представя в двукоординатна система:

$$\begin{aligned}
(2 - 2R^2) \frac{\partial C_1}{\partial Z_1} &= \text{Fo}_1 \left(\frac{1}{R} \frac{\partial C_1}{\partial R} + \frac{\partial^2 C_1}{\partial R^2} \right) - K_1 (C_1 - C_2); \\
R=0, \quad \frac{\partial C_1}{\partial R} &\equiv 0; \quad R=1, \quad \frac{\partial C_1}{\partial R} \equiv 0; \quad Z_1=0, \quad C_1 \equiv 1.
\end{aligned} \tag{24}$$

$$\begin{aligned}
(2 - 2R^2) \frac{\partial C_2}{\partial Z_2} &= \text{Fo}_2 \left(\frac{1}{R} \frac{\partial C_2}{\partial R} + \frac{\partial^2 C_2}{\partial R^2} \right) + K_2 (C_1 - C_2); \\
R=0, \quad \frac{\partial C_2}{\partial R} &\equiv 0; \quad R=1, \quad \frac{\partial C_2}{\partial R} \equiv 0; \quad Z_2=0, \quad C_2 \equiv 0.
\end{aligned} \tag{25}$$

$$K_1 = \frac{k_0 l}{u_1^0}, \quad K_2 = \frac{k_0 l \chi}{u_2^0}, \quad \text{Fo}_j = \frac{D_j l}{u_j^0 r_0^2}, \quad j = 1, 2. \quad (26)$$

Численото решение на системата уравнения (24, 25) може да бъде направено с програма на MATLAB чрез една итеративна процедура, където разпределението на концентрациите в колоната ще бъде представено в две матрични форми на всяка итеративна стъпка s :

$$C_1^s(R, Z_1) = \|a_{\rho\zeta_1}^s\|, \quad \rho = 1, 2, \dots, \rho^0, \quad \zeta_1 = 1, 2, \dots, \zeta^0, \quad (27)$$

$$0 \leq R \leq 1, \quad 0 \leq Z_1 \leq 1, \quad R = \frac{\rho-1}{\rho^0-1}, \quad Z_1 = \frac{\zeta_1-1}{\zeta^0-1}, \quad \rho^0 = \zeta^0.$$

$$C_2^s(R, Z_2) = \|b_{\rho\zeta_2}^s\|, \quad \rho = 1, 2, \dots, \rho^0, \quad \zeta_2 = 1, 2, \dots, \zeta^0, \quad (28)$$

$$0 \leq R \leq 1, \quad 0 \leq Z_2 \leq 1, \quad R = \frac{\rho-1}{\rho^0-1}, \quad Z_2 = \frac{\zeta_2-1}{\zeta^0-1}.$$

Итеративната процедура започва с нулевата стъпка $s = 0$:

$$C_2^0(R, Z_2) = \|b_{\rho\zeta_2}^0\| \equiv 0, \quad \rho = 1, 2, \dots, \rho^0, \quad \zeta_2 = 1, 2, \dots, \zeta^0; \quad (29)$$

$$C_1^0(R, Z_1) = \|a_{\rho\zeta_1}^0\|, \quad \rho = 1, 2, \dots, \rho^0, \quad \zeta_1 = 1, 2, \dots, \zeta^0,$$

където $C_1^0(R, Z_1)$ е решение на задачата:

$$(2 - 2R^2) \frac{\partial C_1^0}{\partial Z_1} = \text{Fo}_1 \left(\frac{1}{R} \frac{\partial C_1^0}{\partial R} + \frac{\partial^2 C_1^0}{\partial R^2} \right) - K_1 C_1^0; \quad (30)$$

$$R = 0, \quad \frac{\partial C_1^0}{\partial R} \equiv 0; \quad R = 1, \quad \frac{\partial C_1^0}{\partial R} \equiv 0; \quad Z_1 = 0, \quad C_1^0 \equiv 1.$$

Решението на (30) позволява да се намери новата функция:

$$C_1^0(R, Z_1) = C_1^0(R, 1 - Z_2) = \hat{C}_1^0(R, Z_2) = \|\hat{a}_{\rho\zeta_2}^0\|, \quad (31)$$

$$\rho = 1, 2, \dots, \rho^0, \quad \zeta_2 = 1, 2, \dots, \zeta^0.$$

Итеративната стъпка s е решаването на задачата:

$$(2 - 2R^2) \frac{\partial C_2^s}{\partial Z_2} = \text{Fo}_2 \left(\frac{1}{R} \frac{\partial C_2^s}{\partial R} + \frac{\partial^2 C_2^s}{\partial R^2} \right) + K_2 (\hat{C}_1^{(s-1)} - C_2^s); \quad (32)$$

$$R = 0, \quad \frac{\partial C_2^s}{\partial R} \equiv 0; \quad R = 1, \quad \frac{\partial C_2^s}{\partial R} \equiv 0; \quad Z_2 = 0, \quad C_2^s \equiv 0,$$

където $\hat{C}_1^{(s-1)}(R, Z_2) = \|\hat{a}_{\rho\zeta_2}^{(s-1)}\|$, $\rho = 1, 2, \dots, \rho^0$, $\zeta_2 = 1, 2, \dots, \zeta^0$.

Решението на (32) позволява да се намери новата функция:

$$C_2^s(R, Z_2) = C_2^s(R, 1 - Z_1) = \hat{C}_2^s(R, Z_1) = \|\hat{b}_{\rho\zeta_1}^s\|, \quad (33)$$

$$\rho = 1, 2, \dots, \rho^0, \quad \zeta_1 = 1, 2, \dots, \zeta^0,$$

която ще бъде използвана за решаването на (30) на итеративна стъпка s :

$$\begin{aligned} (2 - 2R^2) \frac{\partial C_1^s}{\partial Z_1} &= \text{Fo}_1 \left(\frac{1}{R} \frac{\partial C_1^s}{\partial R} + \frac{\partial^2 C_1^s}{\partial R^2} \right) - K_1 (C_1^s - \hat{C}_2^s); \\ R = 0, \quad \frac{\partial C_1^s}{\partial R} &\equiv 0; \quad R = 1, \quad \frac{\partial C_1^s}{\partial R} \equiv 0; \quad Z_1 = 0, \quad C_1^s \equiv 1. \end{aligned} \quad (34)$$

Решението на (34) позволява да се намери новата функция:

$$\begin{aligned} C_1^s(R, Z_1) &= C_1^s(R, 1 - Z_2) = \hat{C}_1^s(R, Z_2) = \left\| \hat{a}_{\rho \zeta_2}^s \right\|, \\ \rho &= 1, 2, \dots, \rho^0, \quad \zeta_2 = 1, 2, \dots, \zeta^0. \end{aligned} \quad (35)$$

Решението на проблема (25, 26) може да бъде намерено с програма на MATLAB. Решават се уравнения (32, 34) с итеративната процедура, използвайки MATLAB функцията `r дере`, която решава частни диференциални уравнения. Получените матрици \hat{C}_1^{s-1} (от (35)) и \hat{C}_2^s (от (33)) се въвеждат в (32) и (34) съответно, използвайки MATLAB функцията `interp2`.

Стоп критерият на итеративната процедура е условието:

$$\left| \frac{a_{\rho \zeta_1}^s - a_{\rho \zeta_1}^{(s-1)}}{a_{\rho \zeta_1}^s} \right| \leq 10^{-3}, \quad \rho = 1, 2, \dots, \rho^0, \quad \zeta_1 = 1, 2, \dots, \zeta^0. \quad (36)$$

Решението на проблема (25, 26) е получено за случая $\text{Fo}_1 = 0.1$, $\text{Fo}_2 = 0.01$, $K_1 = 1$, $K_2 = 0.1$ и разпределенията на концентрациите $C_j(R, Z_j)$ за $Z_j = 0.2, 0.5, 0.8, 1.0$, $j = 1, 2$ са представени на Фиг. 3, 4.

От (22) следва, че определените концентрации $C_j(R, Z_j)$ позволяват определянето на средните концентрации $\bar{C}_j(Z_j)$ и функциите $A_j(Z_j)$, $j = 1, 2$, които са показани на Фиг. 5, 6 за случая $\text{Fo}_1 = 0.1$, $\text{Fo}_2 = 0.01$, $K_1 = 1$, $K_2 = 0.1$. От фигурите се вижда, че тези функции могат да се представят чрез линейни апроксимации:

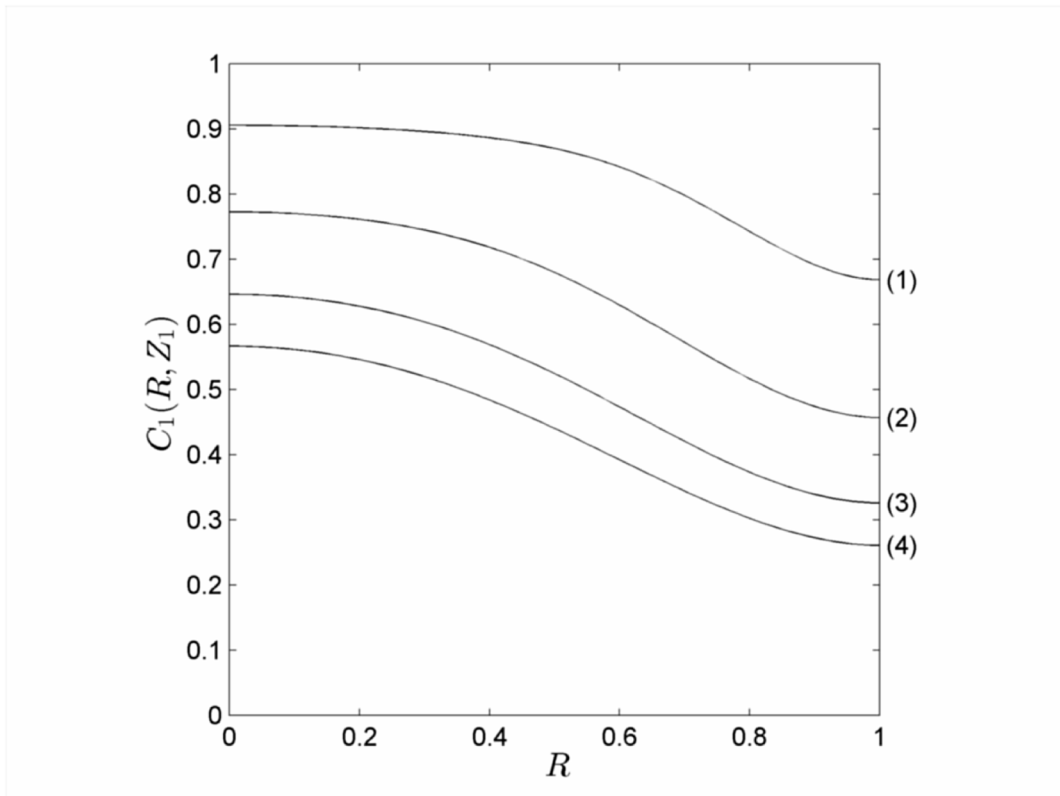
$$A_j = a_{0j} + a_{1j} Z_j, \quad j = 1, 2; \quad (37)$$

и намерените коефициенти са показани в Табл. 2.

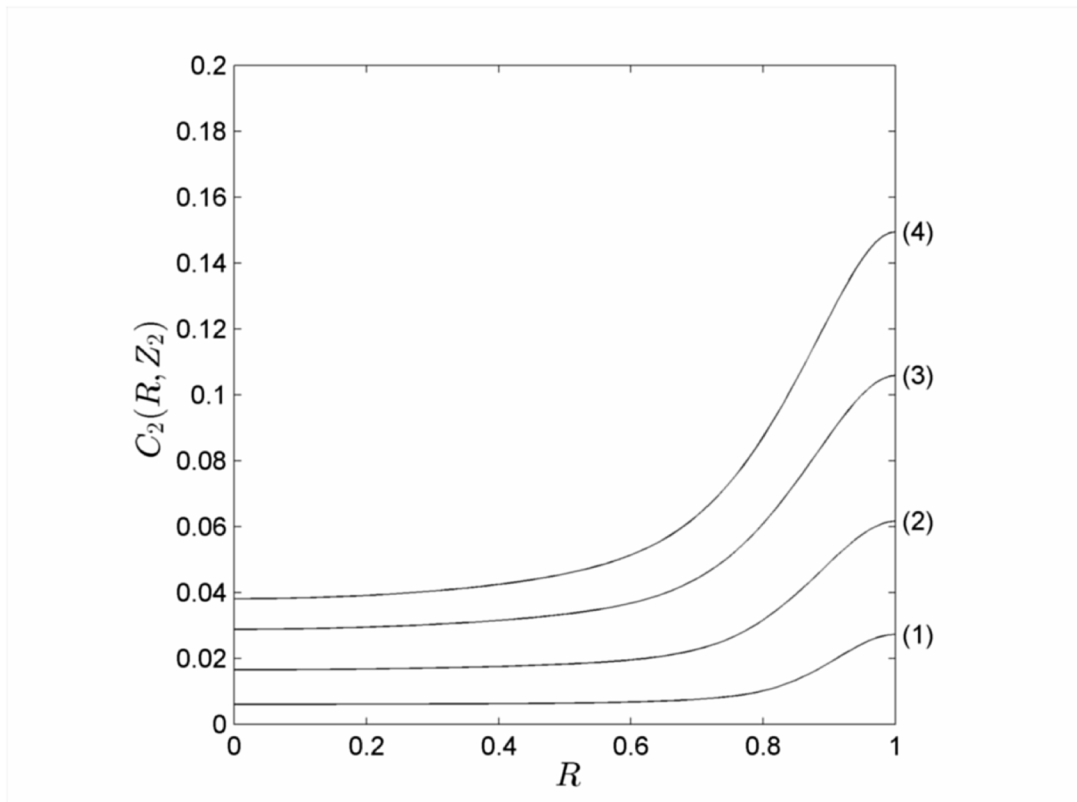
Въвеждането на (37) в (21) за случая $\varepsilon = \text{Pe}_j^{-1} = 0$, $j = 1, 2$ води до:

$$(a_{01} + a_{11} Z_1) \frac{d\bar{C}_1}{dZ_1} + a_{11} \bar{C}_1 = -K_1 (\bar{C}_1 - \bar{C}_2); \quad Z_1 = 0, \quad \bar{C}_1(0) \equiv 1. \quad (38)$$

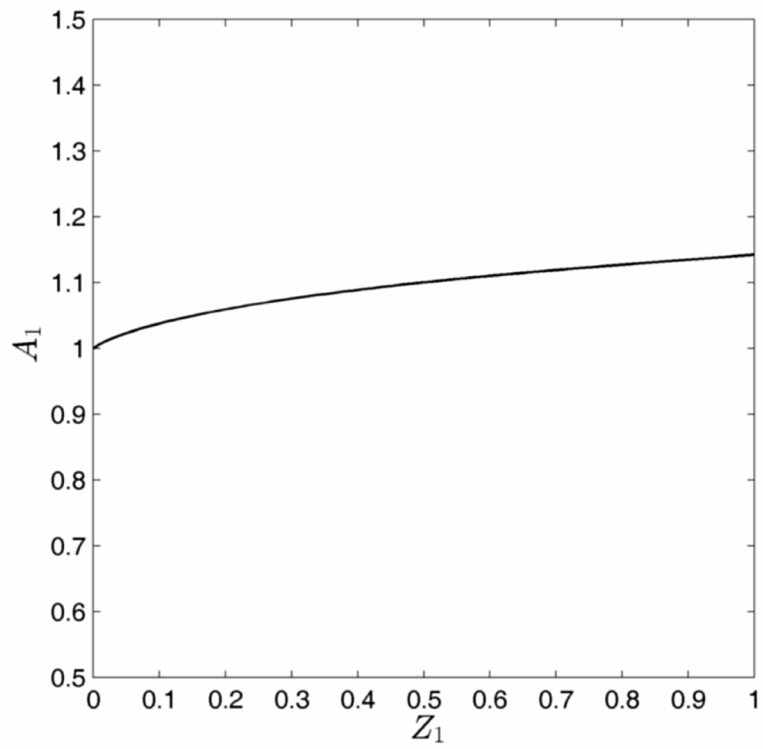
$$(a_{02} + a_{12} Z_2) \frac{d\bar{C}_2}{dZ_2} + a_{12} \bar{C}_2 = K_2 (\bar{C}_1 - \bar{C}_2); \quad Z_2 = 0, \quad \bar{C}_2(0) \equiv 0. \quad (39)$$



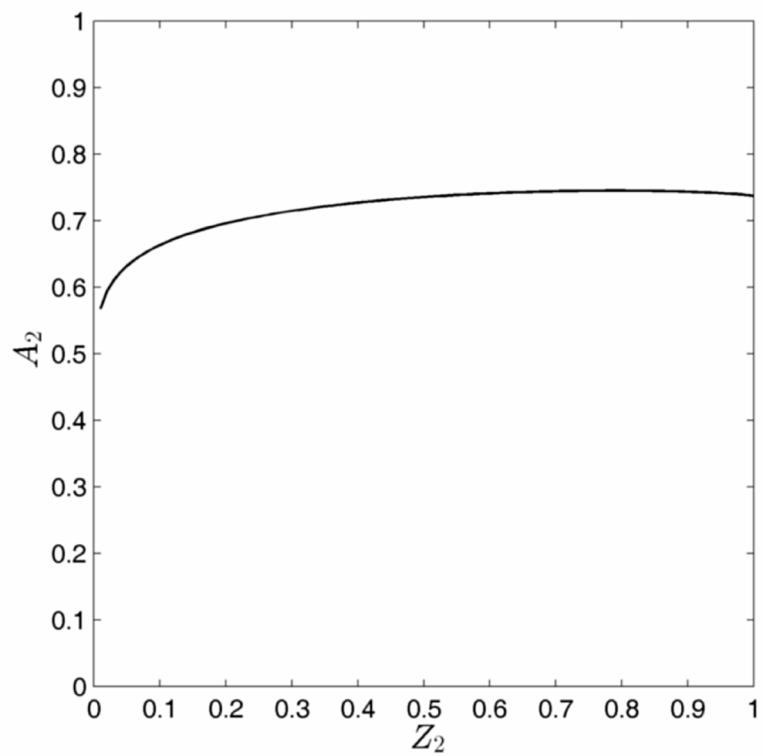
Фиг. 3. Разпределения на концентрацията $C_1(R, Z_1)$ при $Fo_1 = 0.1, K_1 = 1$:
 (1) $C_1(R, 0.2)$; (2) $C_1(R, 0.5)$; (3) $C_1(R, 0.8)$; (4) $C_1(R, 1)$.



Фиг. 4. Разпределения на концентрацията $C_2(R, Z_2)$ при $Fo_2 = 0.01, K_2 = 0.1$:
 (1) $C_2(R, 0.2)$; (2) $C_2(R, 0.5)$; (3) $C_2(R, 0.8)$; (4) $C_2(R, 1)$.



Фиг. 5. Функция $A_1(Z_1)$ за $Fo_1 = 0.1$, $Fo_2 = 0.01$, $K_1 = 1$, $K_2 = 0.1$.



Фиг. 6. Функция $A_2(Z_2)$ за $Fo_1 = 0.1$, $Fo_2 = 0.01$, $K_1 = 1$, $K_2 = 0.1$.

Таблица 2. Стойности на параметрите $a_{0j}, a_{1j}, j = 1, 2$
за $Fo_1 = 0.1, Fo_2 = 0.01, K_1 = 1, K_2 = 0.1$.

$a_{01} = 1.0316$	$a_{11} = 0.1225$	$a_{02} = 0.6664$	$a_{12} = 0.1036$
-------------------	-------------------	-------------------	-------------------

Решението на системата (38, 39) използва аналогична итеративна процедура както при (25, 26).

Изводи

Компютърното моделиране и симулиране на процесите на масопренасяне в колонни апарати на базата на новия подход, с помощта на конвективно-дифузионни и средно-концентрационни модели води до проблема за решаване на диференциални уравнения в две координатни системи в случаите на противоточна абсорбция. Това налага последователно решаване на уравненията в модела в две координатни мрежи с различни стъпки. Този проблем е решен с помощта на в MATLAB функцията `interp2` и чрез една итеративна процедура. В резултат на това се получават разпределенията концентрациите в колоната и ефективността на абсорбционния процес. Предложените алгоритъм и програма са основа за представянето на средно-концентрационния модел като четрипараметричен, за определянето на параметрите в него и за симулиране на абсорбционни процеси в промишлени противоточни колонни апарати [1].

Глава 3. Многостъпков моделиращ алгоритъм

Дълговременните процеси на нестационарна адсорбция в система газ-твърдо се характеризират с това, че процесът в твърдата фаза е нестационарен, докато в газовата фаза е квазистационарен. Решението на проблема ще бъде показано за случая на нестационарна химична адсорбция при дълговременни процеси във високи колони, където конвективно-дифузионният и средно-концентрационният модел в обобщени променливи имат вида:

$$\begin{aligned}
 U(R) \frac{\partial C_{11}}{\partial Z} &= Fo \left(\frac{1}{R} \frac{\partial C_{11}}{\partial R} + \frac{\partial^2 C_{11}}{\partial R^2} \right) - K_0 (C_{11} - C_{13}); \\
 \frac{dC_{13}}{dT} &= K_3 (C_{11} - C_{13}) - Kc_{23}^0 C_{13} C_{23}; \\
 \frac{dC_{23}}{dT} &= -Kc_{11}^0 C_{13} C_{23};
 \end{aligned} \tag{40}$$

$$\begin{aligned}
T = 0, \quad C_{13} \equiv 0, \quad C_{23} \equiv 1; \\
R = 0, \quad \frac{\partial C_{11}}{\partial R} \equiv 0; \quad R = 1, \quad \frac{\partial C_{11}}{\partial R} \equiv 0; \quad Z = 0, \quad C_{11} \equiv 1;
\end{aligned}$$

където (R, Z) са параметри в $C_{13}(T, R, Z)$, $C_{23}(T, R, Z)$, а T е параметър в $C_{11}(T, R, Z)$.

В (40) са използвани безразмерните параметри:

$$Fo = \frac{D_{11}l}{u_1^0 r_0^2}, \quad Pe = \frac{u_1^0 l}{D_{11}}, \quad K = kt^0, \quad K_0 = \frac{k_0 l}{u_1^0}, \quad K_3 = k_0 t^0. \quad (41)$$

$$\begin{aligned}
A \frac{d\bar{C}_{11}}{dZ} + \frac{dA}{dZ} \bar{C}_{11} &= -K_0 (\bar{C}_{11} - \bar{C}_{13}); \\
\frac{d\bar{C}_{13}}{dT} &= K_3 (\bar{C}_{11} - \bar{C}_{13}) - BKc_{23}^0 \bar{C}_{13} \bar{C}_{23}; \\
\frac{d\bar{C}_{23}}{dT} &= -BKc_{11}^0 \bar{C}_{13} \bar{C}_{23}; \\
T = 0, \quad \bar{C}_{13} \equiv 0, \quad \bar{C}_{23} \equiv 1; \quad Z = 0, \quad \bar{C}_{11} \equiv 1,
\end{aligned} \quad (42)$$

където

$$\begin{aligned}
A(T, Z) &= 2 \int_0^1 RU(R) \frac{C_{11}(T, R, Z)}{\bar{C}_{11}(T, Z)} dR, \\
B(T, Z) &= 2 \int_0^1 R \frac{C_{13}(T, R, Z) C_{23}(T, R, Z)}{\bar{C}_{13}(T, Z) \bar{C}_{23}(T, Z)} dR, \\
\bar{C}_{11}(T, Z) &= 2 \int_0^1 RC_{11}(T, R, Z) dR, \\
\bar{C}_{13}(T, Z) &= 2 \int_0^1 RC_{13}(T, R, Z) dR, \\
\bar{C}_{23}(T, Z) &= 2 \int_0^1 RC_{23}(T, R, Z) dR.
\end{aligned} \quad (43)$$

В (42) Z е параметър в $\bar{C}_{13}(T, Z)$, $\bar{C}_{23}(T, Z)$ и T е параметър в $\bar{C}_{11}(T, Z)$.

Решението на уравненията в модела (40) използва многостъпков алгоритъм. Като пример ще бъде използвано параболично разпределение на скоростта (течение на Поазьол):

$$U(R) = 2 - 2R^2. \quad (44)$$

За простота означението на функциите в (40) ще бъде заменено с:

$$C_{11}(T, R, Z) = C(T, R, Z), \quad C_{13}(T, R, Z) = C_1(T, R, Z), \quad C_{23}(T, R, Z) = C_0(T, R, Z) \quad (45)$$

и от (40, 44, 45) се получава:

$$(2-2R^2)\frac{\partial C}{\partial Z} = Fo\left(\frac{1}{R}\frac{\partial C}{\partial R} + \frac{\partial^2 C}{\partial R^2}\right) - K_0(C-C_1);$$

$$R=0, \quad \frac{\partial C}{\partial R} \equiv 0; \quad R=1, \quad \frac{\partial C}{\partial R} \equiv 0; \quad Z=0, \quad C \equiv 1. \quad (46)$$

$$\frac{dC_1}{dT} = K_3(C-C_1) - Kc_{23}^0 C_1 C_0; \quad T=0, \quad C_1 \equiv 0. \quad (47)$$

$$\frac{dC_0}{dT} = -Kc_{11}^0 C_1 C_0; \quad T=0, \quad C_0 \equiv 1. \quad (48)$$

За решаването на (46-48) се използва многостъпков подход във времето, т.е. решения за различни стойности на $T = \frac{\tau-1}{\tau^0-1}$, ($\tau=1,2,\dots,\tau^0$), $R = \frac{\rho-1}{\rho^0-1}$, ($\rho=1,2,\dots,\rho^0$), $Z = \frac{\zeta-1}{\zeta^0-1}$, ($\zeta=1,2,\dots,\zeta^0$), $\rho^0 = \zeta^0$, където горният индекс s ($s=1,2,\dots,\tau^0$) ще бъде номера на стъпката. На всяка стъпка $s=1,2,\dots,\tau^0$, решението на (46-48) ще бъде получавано в 3 матрични форми:

$$C^s(T,R,Z) = \|C_{\tau\rho\zeta}^s\|, \quad C_0^s(T,R,Z) = \|C_{(0)\tau\rho\zeta}^s\|, \quad C_1^s(T,R,Z) = \|C_{(1)\tau\rho\zeta}^s\|;$$

$$T = \frac{\tau-1}{\tau^0-1}, \quad \tau=1,2,\dots,\tau^0; \quad R = \frac{\rho-1}{\rho^0-1}, \quad \rho=1,2,\dots,\rho^0; \quad Z = \frac{\zeta-1}{\zeta^0-1}, \quad \zeta=1,2,\dots,\zeta^0; \quad (49)$$

$$0 \leq T \leq 1, \quad 0 \leq R \leq 1, \quad 0 \leq Z \leq 1.$$

Като нулева стъпка ($s=0$) ще бъде използвана

$$C^0(T,R,Z) = \|C_{\tau\rho\zeta}^0\| \equiv C^0(R,Z), \quad C_0^0(T,R,Z) = \hat{C}_0^0 = \|C_{(0)\tau\rho\zeta}^0\| \equiv 1,$$

$$C_1^0(T,R,Z) = \hat{C}_1^0 = \|C_{(1)\tau\rho\zeta}^0\| \equiv 0, \quad (50)$$

където $C^0(R,Z)$ е решение на (71) за $C_1 \equiv 0$, т.е.

$$(2-2R^2)\frac{\partial C^0}{\partial Z} = Fo\left(\frac{1}{R}\frac{\partial C^0}{\partial R} + \frac{\partial^2 C^0}{\partial R^2}\right) - KC^0;$$

$$R=0, \quad \frac{\partial C^0}{\partial R} \equiv 0; \quad R=1, \quad \frac{\partial C^0}{\partial R} \equiv 0; \quad Z=0, \quad C^0 \equiv 1. \quad (51)$$

Стъпката s е решение на системата уравнения:

$$\frac{dC_1^s}{dT} = K_0(C^{(s-1)} - C_1^s) - K_3c_{23}^0 C_0^s C_1^s; \quad T=0, \quad C_1^s \equiv \hat{C}_1^{(s-1)}(R,Z). \quad (52)$$

$$\frac{dC_0^s}{dT} = -K_3c_{11}^0 C_0^s C_1^s; \quad T=0, \quad C_0^s \equiv \hat{C}_0^{(s-1)}(R,Z). \quad (53)$$

Решението на (52, 53) позволява да бъде намерено:

$$\hat{C}_0^s(R, Z) = C_0^s\left(\frac{1}{\tau^0}, R, Z\right) = \left\| C_{(0)1\rho\zeta}^s \right\|; \quad \hat{C}_1^s(R, Z) = C_1^s\left(\frac{1}{\tau^0}, R, Z\right) = \left\| C_{(1)1\rho\zeta}^s \right\|. \quad (54)$$

Намерената функция $\hat{C}_1^s(R, Z)$ позволява да се определи $C^s(R, Z) = \left\| C_{1\rho\zeta}^s \right\|$, като решение на (46) на стъпка s :

$$\begin{aligned} (2 - 2R^2) \frac{\partial C^s}{\partial Z} &= \text{Fo} \left(\frac{1}{R} \frac{\partial C^s}{\partial R} + \frac{\partial^2 C^s}{\partial R^2} \right) - K(C^s - \hat{C}_1^s); \\ R = 0, \quad \frac{\partial C^s}{\partial R} &\equiv 0; \quad R = 1, \quad \frac{\partial C^s}{\partial R} \equiv 0; \quad Z = 0, \quad C^s \equiv 1. \end{aligned} \quad (55)$$

Крайт на многостъпковата изчислителна процедура е $s = \tau^0$ и решението на (46-48) е:

$$\begin{aligned} C(T, R, Z) &= \left\| C_{\tau\rho\zeta}^{\tau^0} \right\|, \quad C_0(T, R, Z) = \left\| C_{(0)\tau\rho\zeta}^{\tau^0} \right\|, \quad C_1(T, R, Z) = \left\| C_{(1)\tau\rho\zeta}^{\tau^0} \right\|; \\ T &= \frac{\tau - 1}{\tau^0 - 1}, \quad \tau = 1, 2, \dots, \tau^0; \quad R = \frac{\rho - 1}{\rho^0 - 1}, \quad \rho = 1, 2, \dots, \rho^0; \quad Z = \frac{\zeta - 1}{\zeta^0 - 1}, \quad \zeta = 1, 2, \dots, \zeta^0. \end{aligned} \quad (56)$$

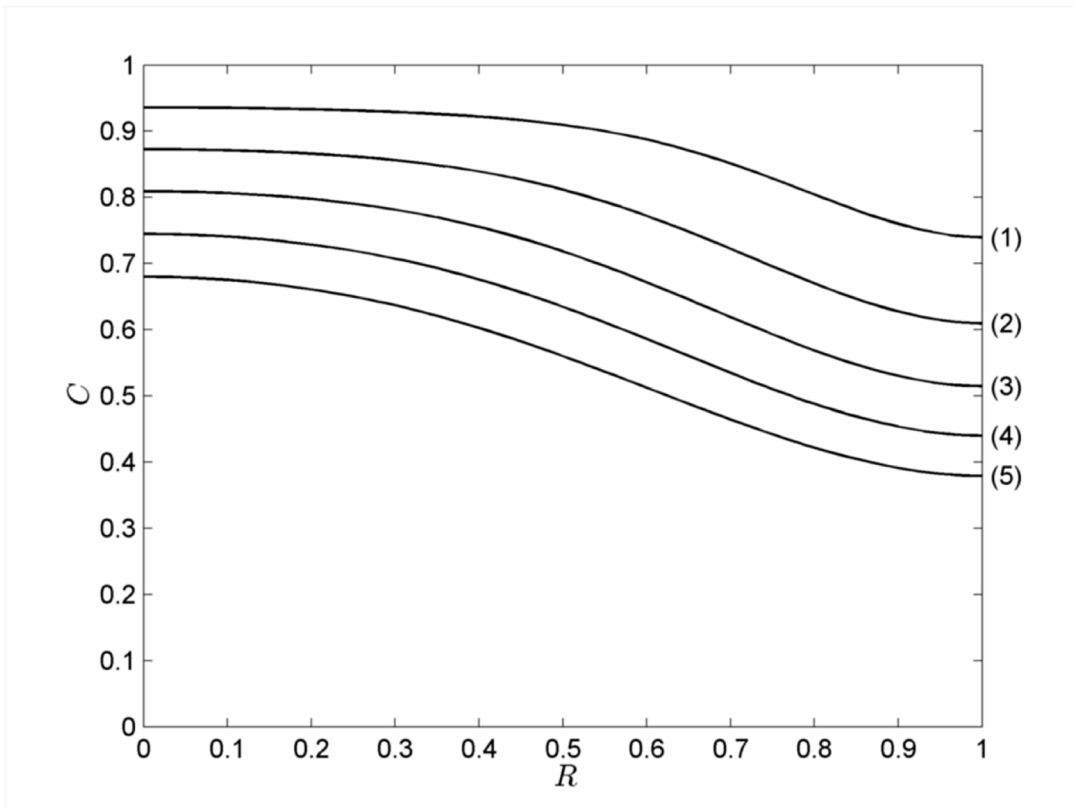
Решението на проблема (71-73) се получава с програма на MATLAB, използвайки многостъпков алгоритъм. Първо се решават уравнения (47, 48) с помощта на MATLAB функцията ode45, която решава обикновени диференциални уравнения. Намерената матрица \hat{C}_1 се въвежда в (46), използвайки MATLAB функцията interp2. След това се решава уравнение (46), използвайки MATLAB функцията rdepe, която решава частни диференциални уравнения.

Решението на (46-48) е получено за случая $\text{Fo} = 0.1$, $K = K_0 = K_3 = 1$, $c_{11}^0 = c_{23}^0 = 1$. Разпределенията на концентрацията $C(0.6, R, Z)$ за $Z = 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$, и $C(T, 0.2, Z)$ за $T = 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$, са представени на Фиг. 7, 8. Разпределенията на концентрацията $C_0(T, 0.5, Z)$ за $Z = 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$, и $C_0(T, 0.5, Z)$ за $T = 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$, са представени на Фиг. 9, 10.

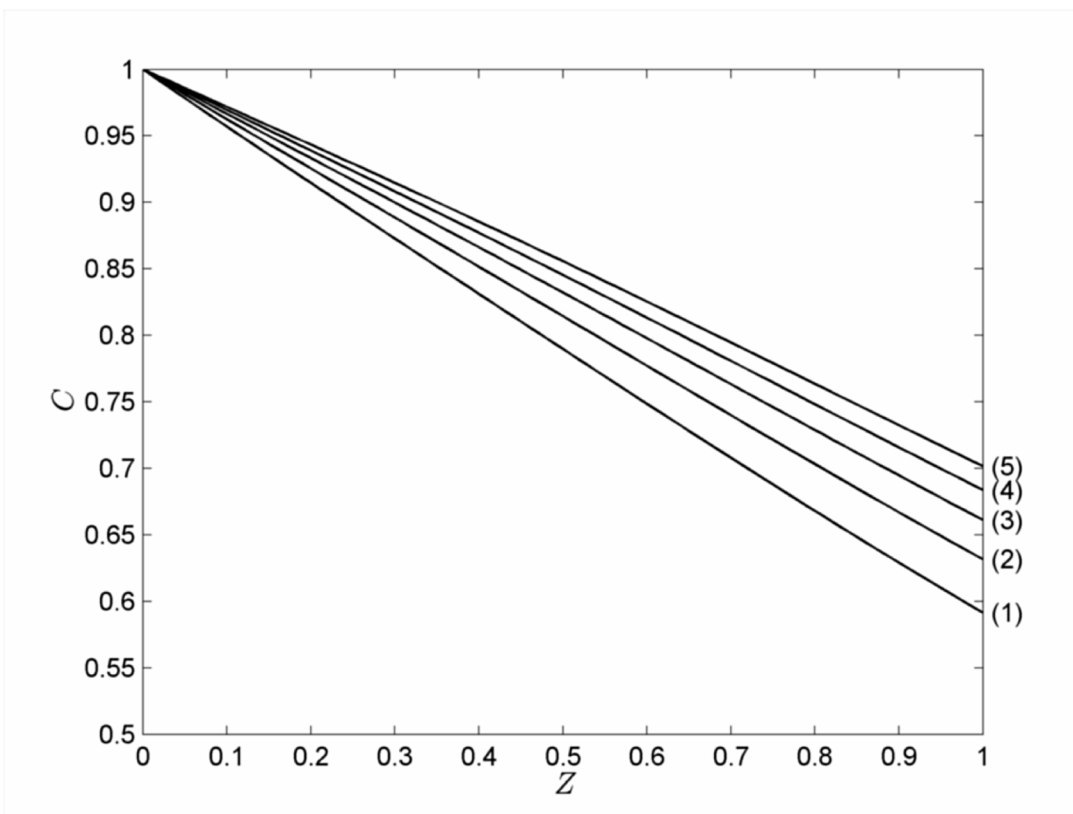
Полученото решение на уравненията на модела (46-48) позволява да се намерят функциите в (43) - $\bar{C}(T, Z)$, $\bar{C}_0(T, Z)$, $\bar{C}_1(T, Z)$, $A(T, Z)$, $B(T, Z)$, където $B(T, Z) \equiv 1$. Резултатите са показани на Фиг. 11-14, където се вижда, че функцията $A(T, Z)$ може да се представи посредством линейна апроксимация:

$$A = a_0 + a_1 T + a_2 Z. \quad (57)$$

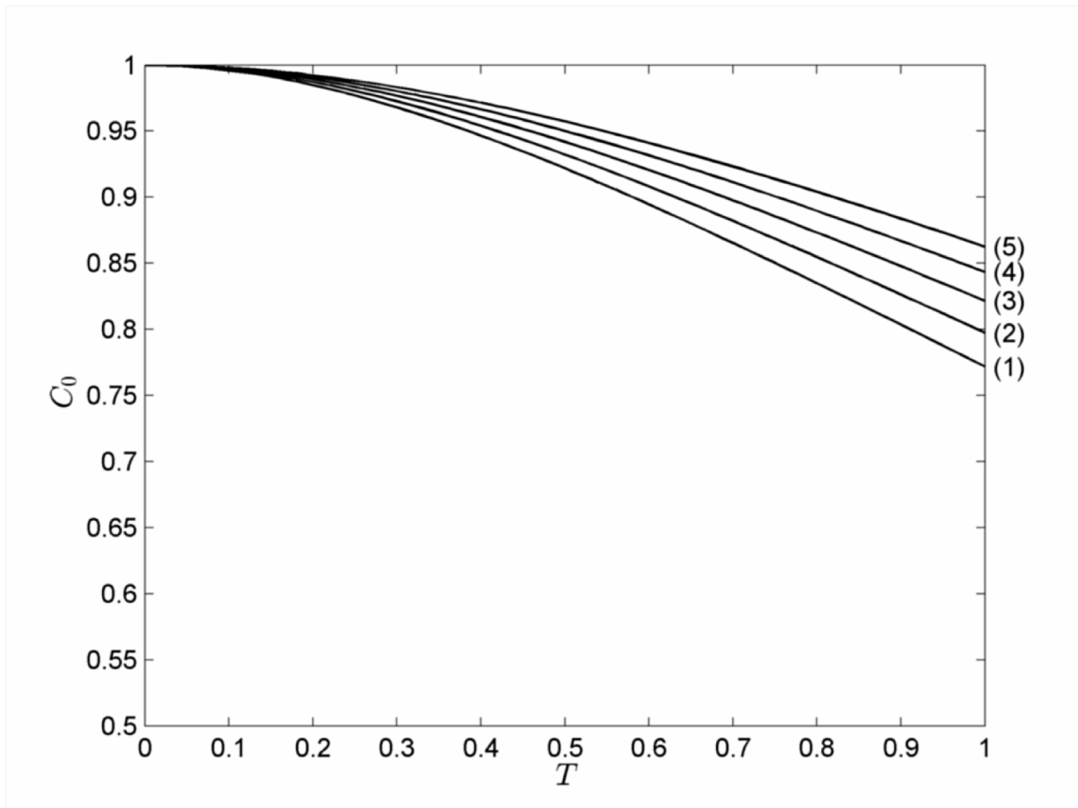
Решението на (42) използва аналогичен алгоритъм и резултатите за случая в Табл. 3 са показани (пунктираните линии) на Фиг. 11-14.



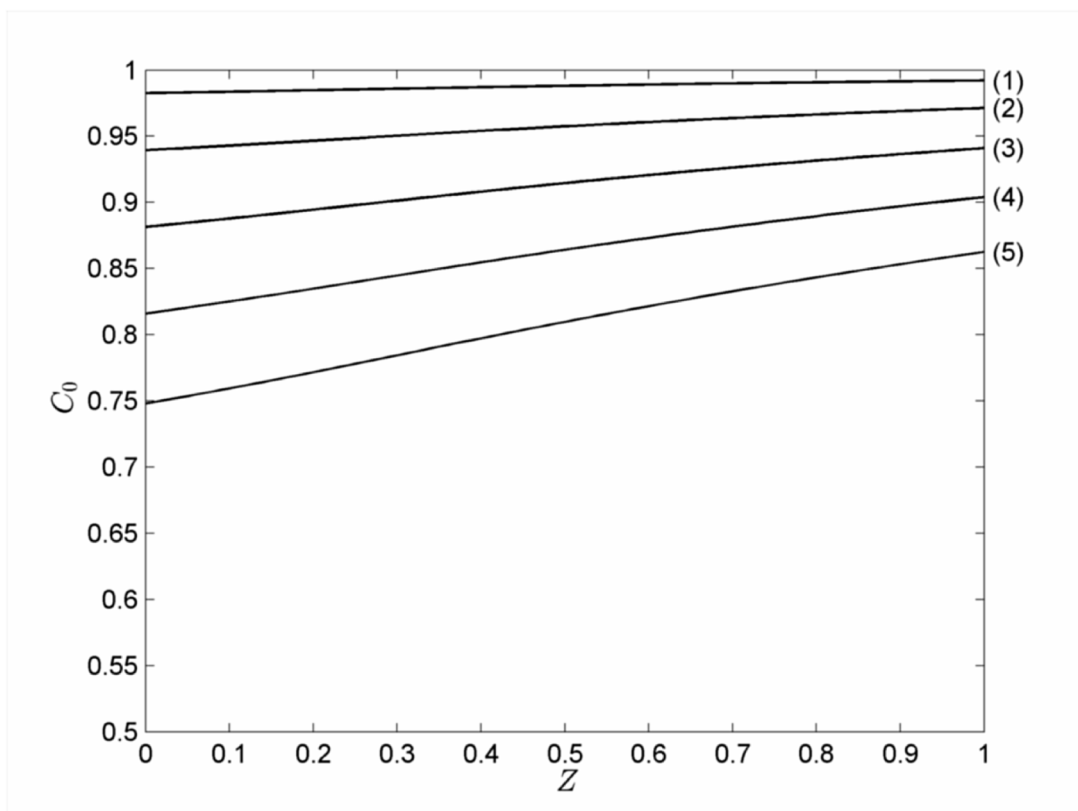
Фиг. 7. Разпределения на концентрацията $C(0.6,R,Z)$:
 (1) $Z = 0.2$; (2) $Z = 0.4$; (3) $Z = 0.6$; (4) $Z = 0.8$; (5) $Z = 1.0$.



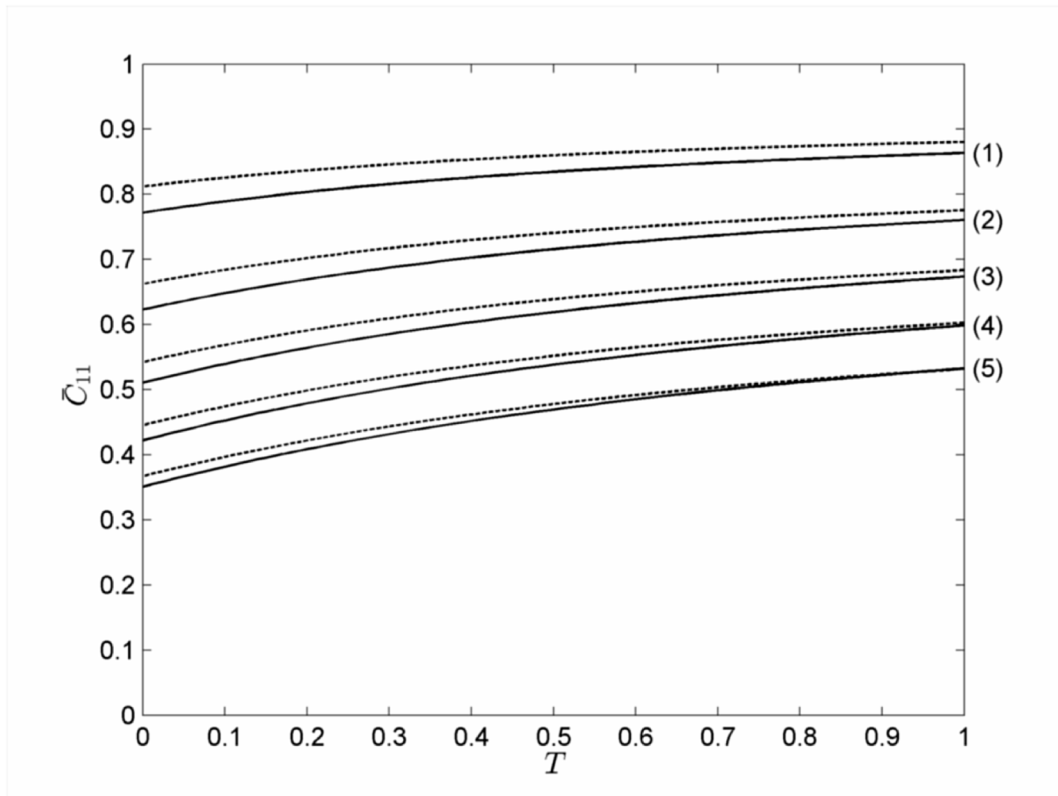
Фиг. 8. Разпределения на концентрацията $C(T,0.2,Z)$:
 (1) $T = 0.2$; (2) $T = 0.4$; (3) $T = 0.6$; (4) $T = 0.8$; (5) $T = 1.0$.



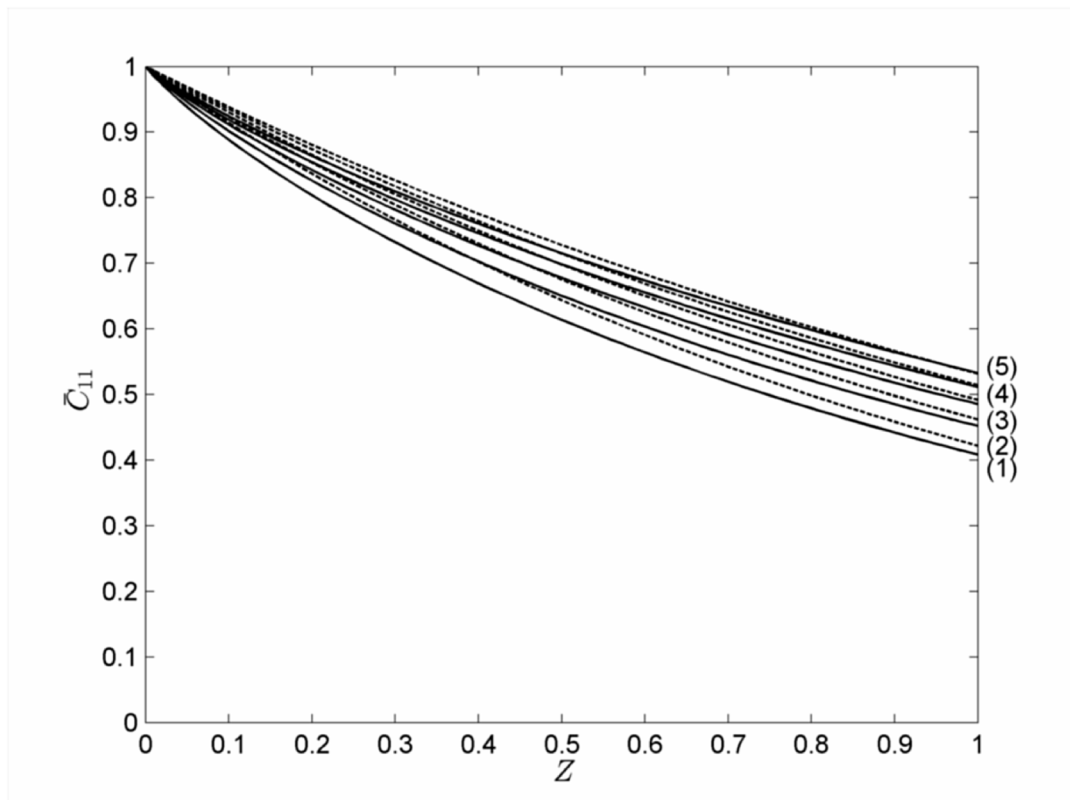
Фиг. 9. Разпределения на концентрацията $C_0(T,0.5,Z)$:
 (1) $Z = 0.2$; (2) $Z = 0.4$; (3) $Z = 0.6$; (4) $Z = 0.8$; (5) $Z = 1.0$.



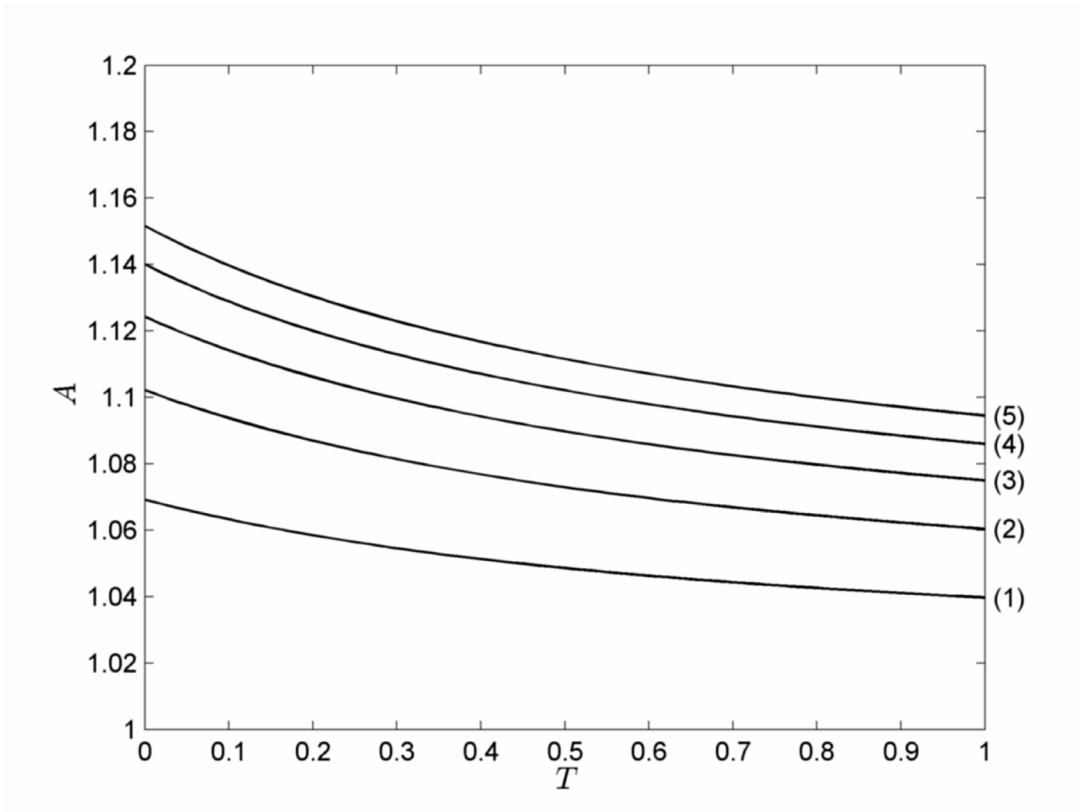
Фиг. 10. Разпределения на концентрацията $C_0(T,0.5,Z)$:
 (1) $T = 0.2$; (2) $T = 0.4$; (3) $T = 0.6$; (4) $T = 0.8$; (5) $T = 1.0$.



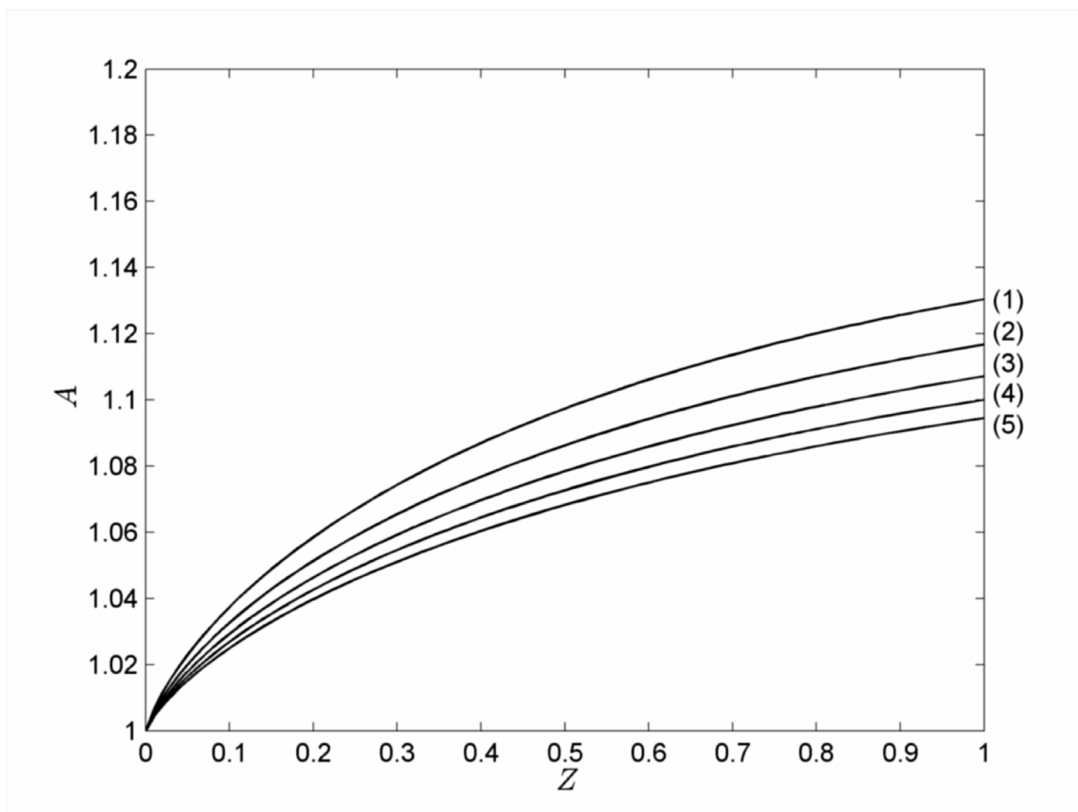
Фиг. 11. Функция $\bar{C}_{11} = \bar{C}(T, Z)$: (1) $Z = 0.2$; (2) $Z = 0.4$; (3) $Z = 0.6$; (4) $Z = 0.8$; (5) $Z = 1.0$;
Пунктирните линии са решение на (67) със стойностите на параметрите a_0, a_t, a_z в Табл. 3.



Фиг. 12. Функция $\bar{C}_{11} = \bar{C}(T, Z)$: (1) $T = 0.2$; (2) $T = 0.4$; (3) $T = 0.6$; (4) $T = 0.8$; (5) $T = 1.0$;
Пунктирните линии са решение на (67) със стойностите на параметрите a_0, a_t, a_z в Табл. 3.



Фиг. 13. Функция $A(T, Z)$: (1) $Z = 0.2$; (2) $Z = 0.4$; (3) $Z = 0.6$; (4) $Z = 0.8$; (5) $Z = 1.0$.



Фиг. 14. Функция $A(T, Z)$: (1) $T = 0.2$; (2) $T = 0.4$; (3) $T = 0.6$; (4) $T = 0.8$; (5) $T = 1.0$.

Таблица 3. Стойности на параметрите a_0, a_z, a_t за случая

$$Fo = 0.1, K = K_0 = K_3 = 1, c_{11}^0 = c_{23}^0 = 1.$$

a_0	1,0473
a_z	0,0992
a_t	-0,0387

Изводи

Компютърното моделиране и симулиране на процесите на масопренасяне в колонни апарати на базата на новия подход, с помощта на конвективно-дифузионни и средно-концентрационни модели, в случаите на дълги адсорбционни процеси, води до проблема за решаване на диференциални уравнения в две координатни системи, когато времето е параметър в частта на модела за газовата фаза, докато аксиалните и радиалните координати са параметри в частта на модела за твърдата фаза. В тези случаи беше използван многостъпков алгоритъм, където стъпката е кратък интервал от време. В резултат са получени разпределенията концентрациите в колоната. Предложените алгоритъм и програма са основа за представянето на средно-концентрационния модел като трипараметричен, за определянето на параметрите в него и за симулиране на адсорбционни процеси в промишлени колонни апарати [2, 4].

Глава 4. Системи от диференциални и функционални уравнения

Конвективно-дифузионният модел на дълготраен каталитичен процес е стационарен, тъй като се поддържа постоянна концентрация на активните места на катализаторната повърхност (в резултат на десорбцията на реакционния продукт). В случаите на физична адсорбция на каталитичната повърхност моделът в обобщени променливи за високи колони има вида:

$$\begin{aligned}
 U(R) \frac{\partial C_{11}}{\partial Z} &= Fo_{11} \left(\frac{1}{R} \frac{\partial C_{11}}{\partial R} + \frac{\partial^2 C_{11}}{\partial R^2} \right) - K_{01} (C_{11} - C_{13}); \\
 U(R) \frac{\partial C_{21}}{\partial Z} &= Fo_{21} \left(\frac{1}{R} \frac{\partial C_{21}}{\partial R} + \frac{\partial^2 C_{21}}{\partial R^2} \right) - K_{02} (C_{21} - C_{23}); \\
 R = 0, \quad \frac{\partial C_{i0}}{\partial R} &\equiv 0; \quad R = 1, \quad \frac{\partial C_{i0}}{\partial R} \equiv 0; \\
 Z = 0, \quad C_{i0} &\equiv 1; \quad i = 1, 2,
 \end{aligned} \tag{58}$$

където решението на (58) зависи от две функции:

$$C_{13} = \frac{C_{11} + K_1(1 - C_{33})}{1 + K_2 C_{33}}, \quad C_{23} = \frac{C_{21}}{1 + K_3(1 - C_{33})}, \quad (59)$$

а C_{33} е решение на кубичното уравнение:

$$\begin{aligned} \omega_3 (C_{33})^3 + \omega_2 (C_{33})^2 + \omega_1 C_{33} + \omega_0 &= 0, \\ \omega_3 &= K_3 (K_1 K_4 - K_2 K_5), \\ \omega_2 &= K_5 (K_2 + 2K_2 K_3 - K_3) - K_4 (K_1 + 2K_1 K_3 + K_3 C_{11}) + K_2 C_{21}, \\ \omega_1 &= K_4 (C_{11} + K_1)(1 + K_3) + K_5 (1 + 2K_3 - K_2 - K_2 K_3) + (1 - K_2) C_{21}, \\ \omega_0 &= -C_{21} - K_3 K_5 - K_5. \end{aligned} \quad (60)$$

Като решение на (60) ще бъдат използвани формулите на Кардано и $0 \leq C_{33} \leq 1$.

Решенията на уравненията на модела (58-60) ще бъде направено в случая

$$K_{0i} = 1, \quad Fo_{i0} = 0.1, \quad i = 1, 2, \quad K_1 = 1, \quad K_2 = 0.5, \quad K_3 = K_4 = K_5 = 1 \quad (61)$$

при параболично разпределение на скоростта (течение на Поазьол) в газовата фаза:

$$u_1 = \bar{u}_1 \left(2 - 2 \frac{r^2}{r_0^2} \right), \quad U(R) = 2 - 2R^2. \quad (62)$$

Решението на системата диференциални-функционални уравнения (58-60) ще бъде получено в 5 матрични форми:

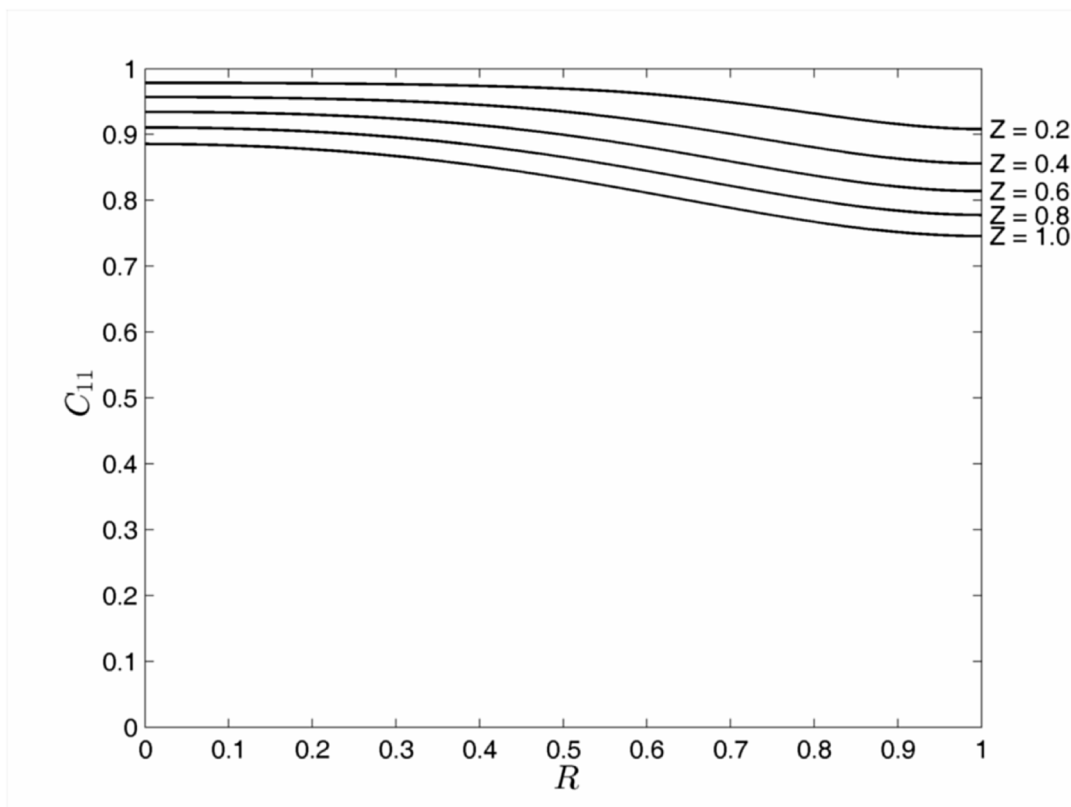
$$\begin{aligned} C_{11}(R, Z) &= \|C_{11(\rho\zeta)}\|, \quad C_{21}(R, Z) = \|C_{21(\rho\zeta)}\|, \quad C_{13}(R, Z) = \|C_{13(\rho\zeta)}\|, \quad C_{23}(R, Z) = \|C_{23(\rho\zeta)}\|, \\ C_{33}(R, Z) &= \|C_{33(\rho\zeta)}\|; \quad R = \frac{\rho - 1}{\rho^0 - 1}, \quad \rho = 1, 2, \dots, \rho^0; \quad Z = \frac{\zeta - 1}{\zeta^0 - 1}, \quad \zeta = 1, 2, \dots, \zeta^0, \quad \rho^0 = \zeta^0. \end{aligned} \quad (63)$$

Намерените радиални разпределения на концентрациите за различни Z са представени на Фиг. 15-19.

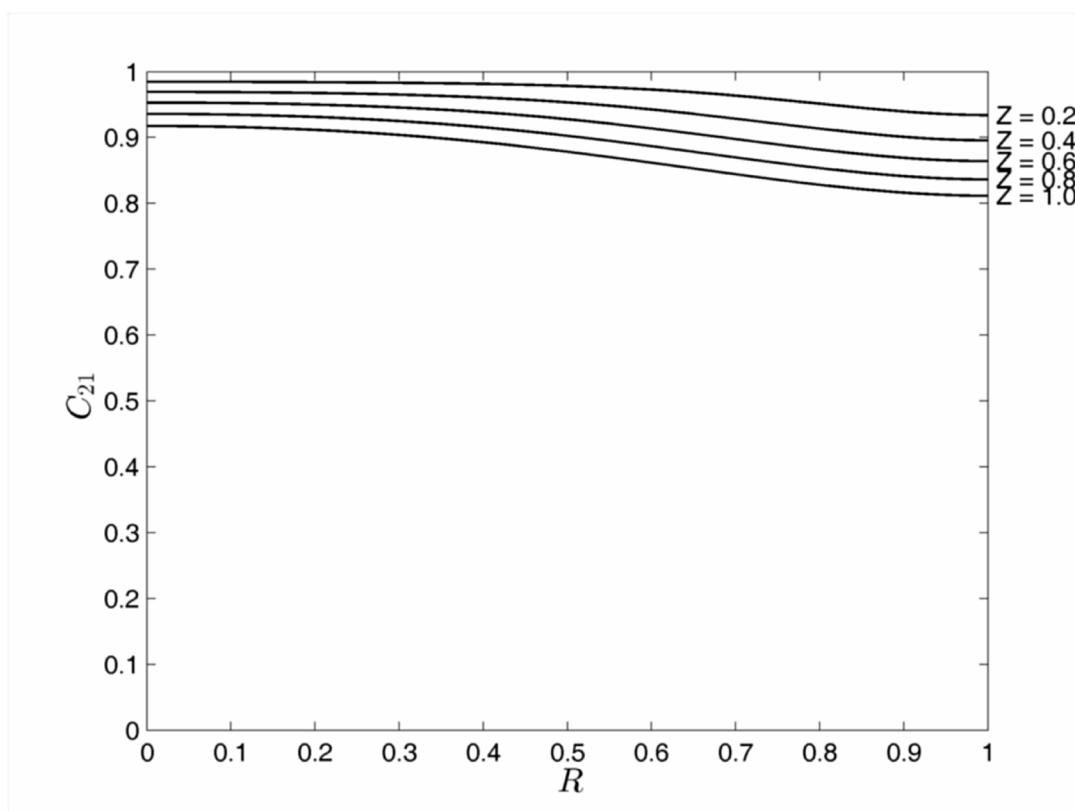
Моделът на средните концентрации за високи колони в обобщени променливи има вида:

$$\begin{aligned} A_1 \frac{d\bar{C}_{11}}{dZ} + \frac{dA_1}{dZ} \bar{C}_{11} &= -K_{01} (\bar{C}_{11} - \bar{C}_{13}); \\ A_2 \frac{d\bar{C}_{21}}{dZ} + \frac{dA_2}{dZ} \bar{C}_{21} &= -K_{02} (\bar{C}_{21} - \bar{C}_{23}); \\ Z = 0, \quad \bar{C}_{11} &\equiv 1, \quad \bar{C}_{21} \equiv 1. \end{aligned} \quad (64)$$

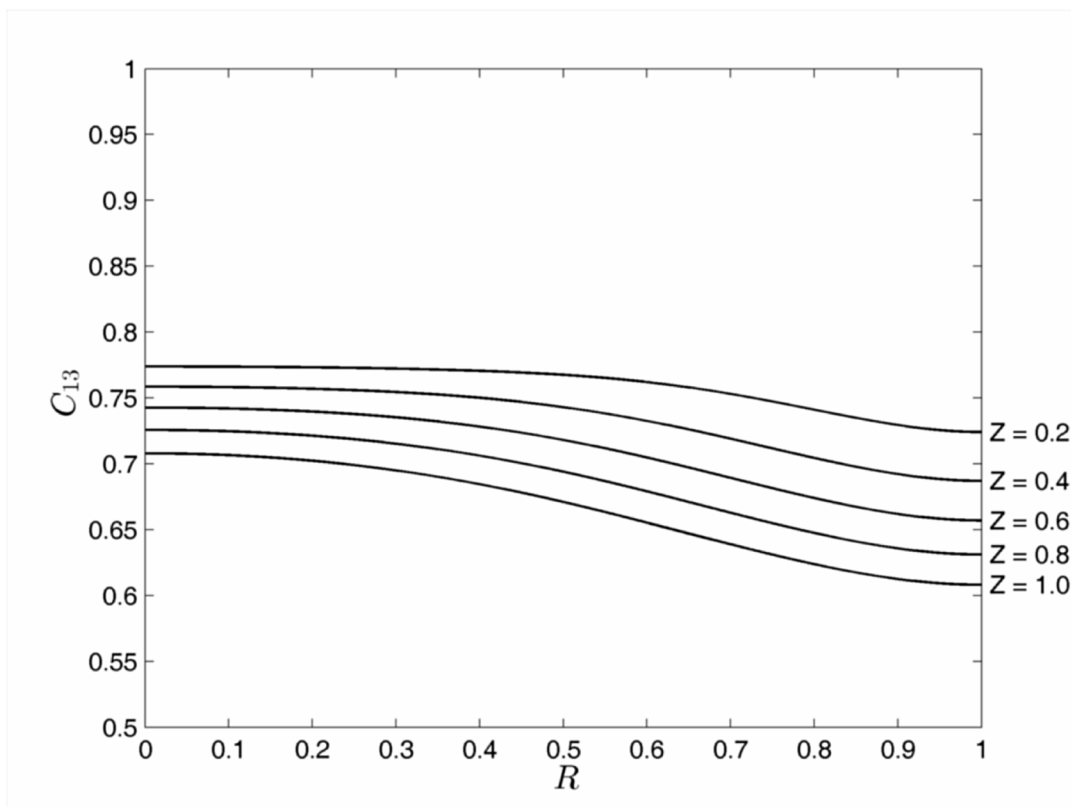
$$\bar{C}_{13} = \frac{\bar{C}_{11} + K_1(1 - \bar{C}_{33})}{1 + BK_2 \bar{C}_{33}}, \quad \bar{C}_{23} = \frac{\bar{C}_{21}}{1 + K_3(1 - G\bar{C}_{33})}, \quad \bar{C}_{33} = \frac{K_5 + \bar{C}_{23}}{BK_4 \bar{C}_{13} + K_5 + G\bar{C}_{23}}. \quad (65)$$



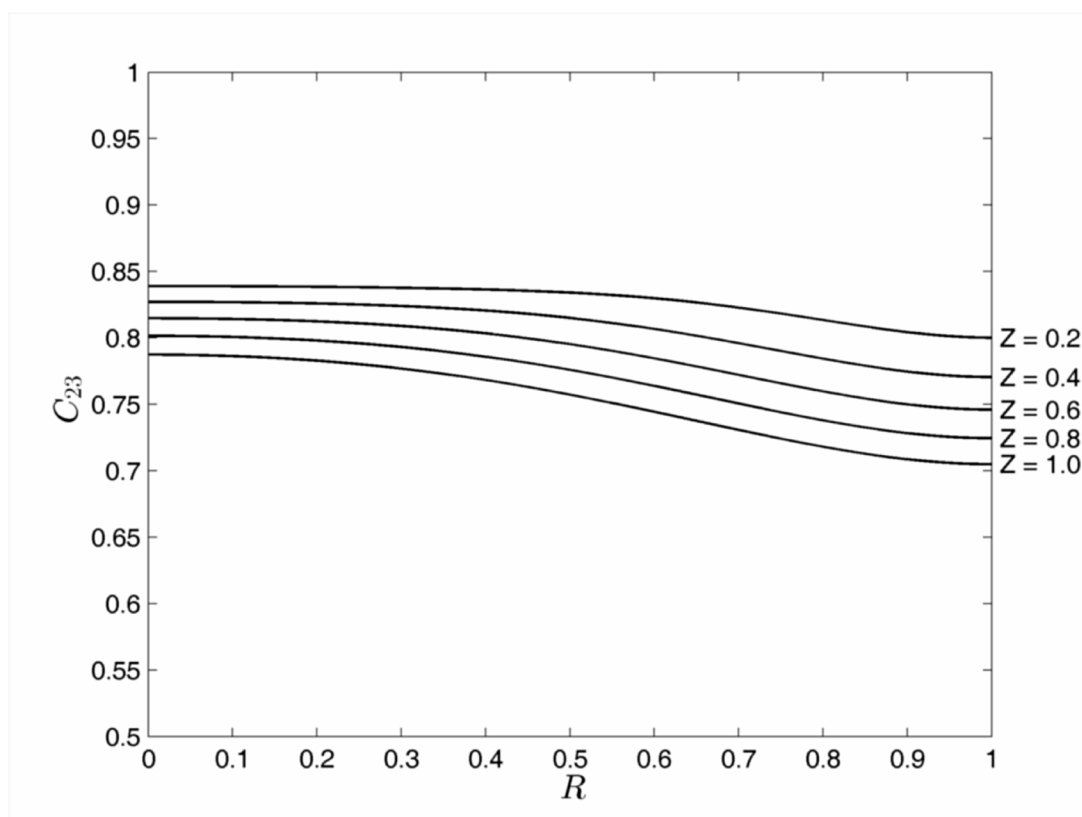
Фиг. 15. Радиално разпределение на концентрацията $C_{11}(R, Z)$.



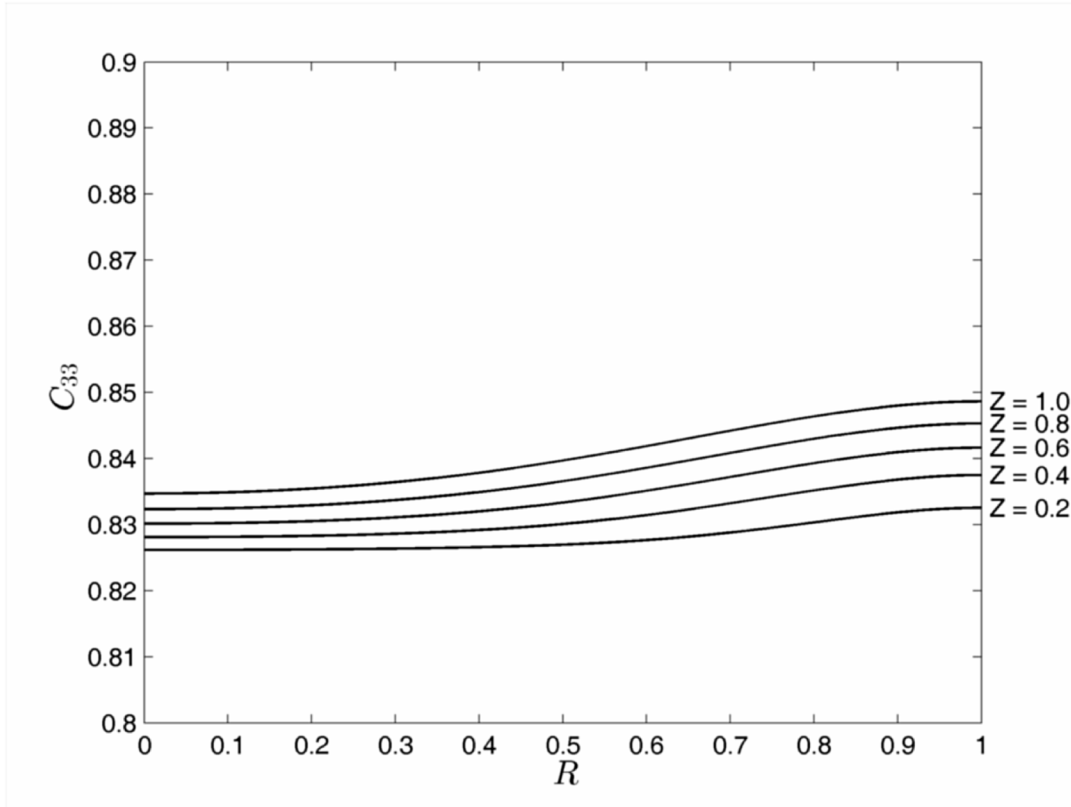
Фиг. 16. Радиално разпределение на концентрацията $C_{21}(R, Z)$.



Фиг. 17. Радиално разпределение на концентрацията $C_{13}(R, Z)$.



Фиг. 18. Радиално разпределение на концентрацията $C_{23}(R, Z)$.



Фиг. 19. Радиално разпределение на концентрацията $C_{33}(R, Z)$.

Новите функции в (64, 65) имат вида:

$$A_i(Z) = 2 \int_0^1 R U(R) \frac{C_{i1}(R, Z)}{\bar{C}_{i1}(Z)} dR, \quad i = 1, 2,$$

$$B(Z) = 2 \int_0^1 R \frac{C_{13}(R, Z)}{\bar{C}_{13}(Z)} \frac{C_{33}(R, Z)}{\bar{C}_{33}(Z)} dR,$$

$$G(Z) = 2 \int_0^1 R \frac{C_{23}(R, Z)}{\bar{C}_{23}(Z)} \frac{C_{33}(R, Z)}{\bar{C}_{33}(Z)} dR,$$

$$\bar{C}_{11}(Z) = 2 \int_0^1 R C_{11}(R, Z) dR,$$

$$\bar{C}_{21}(Z) = 2 \int_0^1 R C_{21}(R, Z) dR,$$

$$\bar{C}_{13}(Z) = 2 \int_0^1 R C_{13}(R, Z) dR,$$

$$\bar{C}_{23}(Z) = 2 \int_0^1 R C_{23}(R, Z) dR,$$

$$\bar{C}_{33}(Z) = 2 \int_0^1 R C_{33}(R, Z) dR.$$

(66)

В (64, 65) $A_i = a_{0i} + a_{1i}Z$, $B = G \equiv 1$ и в резултат се получава:

$$\begin{aligned}(a_{01} + a_{11}Z) \frac{d\bar{C}_{11}}{dZ} + a_{11}\bar{C}_{11} &= -K_{01}(\bar{C}_{11} - \bar{C}_{13}); \\ (a_{02} + a_{12}Z) \frac{d\bar{C}_{21}}{dZ} + a_{12}\bar{C}_{21} &= -K_{02}(\bar{C}_{21} - \bar{C}_{23});\end{aligned}\tag{67}$$

$$Z = 0, \quad \bar{C}_{11} \equiv 1, \quad \bar{C}_{21} \equiv 1.$$

$$\bar{C}_{13} = \frac{\bar{C}_{11} + K_1(1 - \bar{C}_{33})}{1 + K_2\bar{C}_{33}}, \quad \bar{C}_{23} = \frac{\bar{C}_{21}}{1 + K_3(1 - \bar{C}_{33})},\tag{68}$$

където \bar{C}_{33} е решение на кубичното уравнение:

$$\begin{aligned}\omega_3(\bar{C}_{33})^3 + \omega_2(\bar{C}_{33})^2 + \omega_1\bar{C}_{33} + \omega_0 &= 0, \\ \omega_3 &= K_3(K_1K_4 - K_2K_5), \\ \omega_2 &= K_5(K_2 + 2K_2K_3 - K_3) - K_4(K_1 + 2K_1K_3 + K_3\bar{C}_{11}) + K_2\bar{C}_{21}, \\ \omega_1 &= K_4(\bar{C}_{11} + K_1)(1 + K_3) + K_5(1 + 2K_3 - K_2 - K_2K_3) + (1 - K_2)\bar{C}_{21}, \\ \omega_0 &= -\bar{C}_{21} - K_3K_5 - K_5.\end{aligned}\tag{69}$$

За решение на (69) се използва формулата на Кардано и коренът $0 \leq \bar{C}_{33} \leq 1$.

Решаването на (67-69) се прави аналогично на (58-60).

Изводи

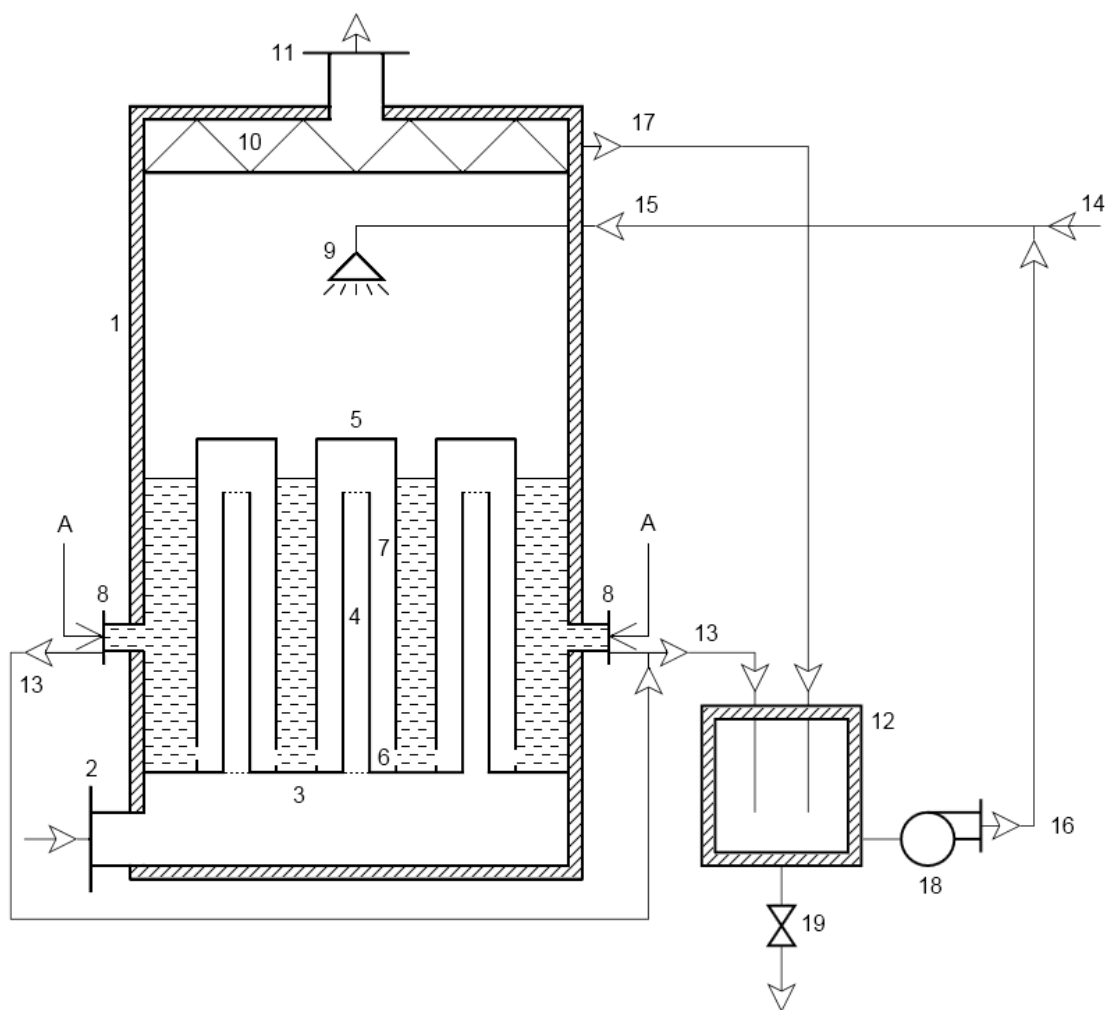
Компютърното моделиране и симулиране на процесите на масопренасяне в колонни апарати на базата на новия подход, с помощта на конвективно-дифузионни и средно-концентрационни модели, в случаите на моделирането на каталитични процеси, където моделите са системи диференциални и функционални уравнения позволи определяне на разпределението на концентрациите в колоната. Предложените алгоритъм и програма са основа за представянето на средно-концентрационния модел като четрипараметричен, за определянето на параметрите в него и за симулиране на каталитични процеси в промишлени колонни апарати [5].

Глава 5. Патенти

Решенията на проблемите на компютърното моделиране на процесите в колонните апарати позволи решаването на моделните уравнения на процесите в патенти за очистване на газове от серен диоксид.

Патент № 1. Метод и апарат за абсорбция на газове

Интензифицирането на процеса на абсорбция на средноразтворими газове се реализира в регистрирания патент „Метод и апарат за абсорбция на газове“ (Фиг. 20) чрез увеличаване на конвективното масопренасяне в двете фази в нов метод и апарат за двузонна абсорбция (течност-газови мехури и газ-течни капки).

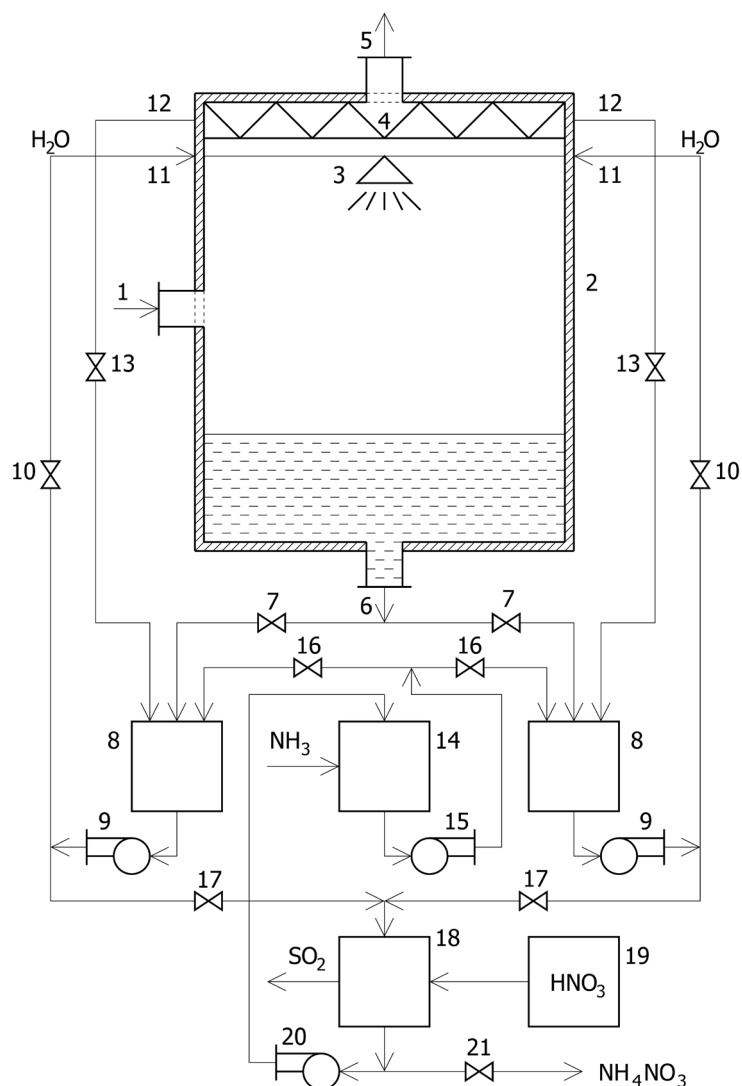


Фиг. 20. Двужонна абсорбционна колона.

Патент № 2. Метод и апарат за почистване на газове от серен диоксид

Методите и апаратите за пречистване на отпадъчни газове от SO_2 , използвайки двуфазен абсорбент (водна суспензия на CaCO_3), има редица недостатъци, най-важните от които са отделянето на еквивалентни количества въглероден диоксид и невъзможността за регенерация на адсорбента. Тези недостатъци са избегнати в регистрирания нов патент „Метод и апарат за почистване на газове от серен диоксид“ (Фиг. 21), където SO_2 се абсорбира с вода, след което разтвореният във водата SO_2 се

адсорбира със синтетичен анионит, който се регенерира с NH_4OH , а от получения $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_3$ се получават концентриран (течен) SO_2 и разтвор на NH_4NO_3 (след третиране с HNO_3).



Фиг. 21. Технологична схема.

Изводи

Моделирането на абсорбцията в горната зона на противоточна колона (Патент № 1) [6, 8, 9] използва алгоритмите и програмите в глава 2. Основните процеси в метода на абсорбция-адсорбция (Патент № 2) са физична абсорбция на SO_2 от H_2O в противоточно течение газ-течни капки и химична адсорбция на SO_2 от частици на синтетичен анионит в система течност-твърдо. Симулирането на противоточната абсорбция [6, 8, 9] и химичната адсорбция [7] използва алгоритмите и програмите в глави 2, 3.

Научни приноси

1. Създадени са алгоритъм и програма за компютърно симулиране на процеси в колонни апарати, когато моделите представляват диференциални уравнения с малък параметър пред старшите производни.

2. Създадени са итеративен алгоритъм и програма за компютърно симулиране на абсорбционни процеси в противоточни колонни апарати, където моделите представляват системи от диференциални уравнения в две координатни системи.

3. Създадени са много-стъпков алгоритъм и програма за компютърно симулиране на нестационарни адсорбционни процеси когато в част от уравненията на модела времето е параметър.

4. Създадени са алгоритъм и програма за компютърно симулиране на хетерогенни каталитични процеси в колонни апарати, където моделите представляват системи от диференциални и функционални уравнения.

5. Създадените алгоритми и програми за компютърно симулиране (1-4) се използват за изчисляване на разпределението на концентрациите, ефективността на процесите, влиянието на радиалната неравномерността на скоростта в моделите на средните концентрации, идентифициране на параметрите на моделите и за симулиране на промишлени процеси.

6. Итеративният алгоритъм и програма за компютърно симулиране на абсорбционни процеси в противоточни колонни апарати е използван за моделиране на процес в регистрирания патент „Метод и апарат за абсорбция на газове”, съдържащ колонен апарат за двузонна абсорбция, позволяващ интензификация на процесите на абсорбция на средно разтворими газове в колонни апарати.

7. Итеративният алгоритъм и програма за компютърно симулиране на адсорбционни процеси в колонни апарати е използван за симулиране на процес в регистрирания патент „Метод и апарат за почистване на газове от серен диоксид”, съдържащ колонни апарати за двустепенна абсорбция-адсорбция, позволяващ регенерация на адсорбента.

Научните приноси в Доктората са в областта на химичното инженерство. Създадените математични модели могат да се използват за симулиране на процесите само ако се създадът подходящи алгоритми за решаване на уравненията в моделите и тяхната програмна реализация.

Научни публикации

- [1] B. Boyadjiev, M. Doichinova, Chr. Boyadjiev, Computer Modeling of Column Apparatuses. 1. Two coordinate systems approach, Journal of Engineering Thermophysics, **24**, № 3, 2015, 247-258. (IF=0.522)
- [2] B. Boyadjiev, M. Doichinova, Chr. Boyadjiev, Computer Modeling of Column Apparatuses. 2. Multi-steps modeling approach, Journal of Engineering Thermophysics, **24**, № 4, 2015, 362-370. (IF=0.522)
- [3] B. Boyadjiev, M. Doichinova, Chr. Boyadjiev, Computer modeling of column apparatuses. 3. Perturbation method approach, Journal of Engineering Thermophysics, **24**, № 4, 2015, 371-380. (IF=0.522)
- [4] Chr. Boyadjiev, B. Boyadjiev, P. Popova-Krumova, M. Doichinova, A new approach for the adsorption columns modeling, Chemical Engineering & Technology, **38**, № 4, 2015, 675-682. (IF=2.175)
- [5] B. Boyadjiev, Chr. Boyadjiev, A new approach for the catalytic processes modeling in columns apparatuses, Int. J. of Modern Trends in Engineering and Research, **2** № 8, 2015, 152-167.
- [6] Chr. Boyadjiev, M. Doichinova, P. Popova-Krumova, B. Boyadjiev, Gas purification from SO₂ in thermal power plants, Chemical Engineering & Technology, **37**, № 7, 2014, 1243-1250. (IF=2.175)(<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/ceat.201300612/abstract>)
- [7] Chr. Boyadjiev, M. Doichinova, P. Popova-Krumova, B. Boyadjiev, On the gas purification from low SO₂ concentration, Recent Innovations in Chemical Engineering, **7**, 2014, 39-46.
- [8] Chr. Boyadjiev, M. Doichinova, P. Popova-Krumova, B. Boyadjiev, On the SO₂ problem in thermal power plants. 1. Absorption processes modeling, Int. J. Eng. Res. **4**, № 10, 2015, 550-557.
- [9] Chr. Boyadjiev, M. Doichinova, P. Popova-Krumova, B. Boyadjiev, On the SO₂ problem in thermal power plants. 2. Two-steps chemical absorption modeling, Int. J. Eng. Res. **4**, № 10, 2015, 557-561.

Патенти

- [P1] Christo Boyadjiev, Boyan Boyadjiev, Maria Doichinova, Petya Popova-Krumova, Method and apparatus for gas absorption, Patent application № 111168, 2013.
- [P2] Christo Boyadjiev, Boyan Boyadjiev, Maria Doichinova, Petya Popova-Krumova, Method and apparatus for gas cleaning from sulfur dioxide, Patent application № 111398, 2014.

Summary

The modeling and simulation are the main approach for the quantitative description of the industrial processes for their optimal design and control. The methods, algorithms and programs for the computer simulation of the processes in the column apparatuses are presented. The analyzed processes are the simple and complex homogeneous chemical reactions, the chemical and physical absorption in co-current and counter-current columns, the chemical and physical adsorption, the heterogeneous catalytic reactions with chemical and physical adsorption mechanism. As a result, the following scientific contributions are offered:

1. It is created algorithm and program for simulation of the processes in the column apparatus in the cases of the presence of small parameters at the highest derivatives.

2. It is created iterative algorithm and program for computer simulation of absorption processes in counter-current column apparatus, where models are systems of differential equations in two coordinate systems.

3. It is created multi-step algorithm and program for computer simulation of non-stationary adsorption processes when in a part of the model equations the time is a parameter.

4. It is created algorithm and program for computer simulation of heterogeneous catalytic processes in column apparatus, which models are systems of differential and functional equations.

5. The created algorithms and programs for computer simulation (1-4) are used for the calculation of the concentration distributions, the processes efficiency, the influence of the radial non-uniformity of the velocity in the average-concentration models, the model parameters identification and the industrial processes simulations.

6. The iterative algorithm and program for computer simulation of absorption processes in counter-current column apparatus is used to the process modeling in a registered patent "Method and apparatus for the absorption of gases", containing column apparatus for bizonal absorption, allowing intensification of the processes of absorption of the average soluble gases in column apparatuses.

7. Iterative algorithm and program for computer simulation of adsorption processes in the column apparatus is used for the process simulation in a registered patent "Method and apparatus for cleaning gases from sulfur dioxide" containing the column apparatus for a two-stage absorption-adsorption, allowing the adsorbent regeneration.