Иван Пенчев, Ирен Цибранска

МАТЕМАТИЧНО МОДЕЛИРАНЕ И МАЩАБНИ ПРЕХОДИ

София, 2004

МАТЕМАТИЧНО МОДЕЛИРАНЕ
И МАЩАБНИ ПРЕХОДИ
Записки, I-во издание
Автори: доц д-р Иван П. Пенчев
доц. д-р Ирен Х. Цибранска
Рецензент: доц.д-р Мария И.Кършева

ISBN 954-8954-48-6

Предпечатна подготовка: УКЦ при ХТМУ
Издател: ХТМУ–София

ПРЕДГОВОР

Представените записки по “Математично моделиране и мащабни преходи” са предназначени за студентите от специалността “Химично инженерство” с преподаване на български, френски и немски език в ХТМУ, които изучават тази специализираща дисциплина. Разгледани са детерминирани модели на масообменни апарати, представени в системи от диференциални уравнения и прилагани за изчисляване на тези апарати в преход от лабораторен към полупромишлен и промишлен мащаб. Курсът изисква от студентите основни познания за процесите и конструкциите на съответните апарати, изучени в курса по “Процеси и апарати”, както и познания по числени методи и програмиране, изучавани в съответните дисциплини по математика и използване на ЕИТ.

Курсът акцентира върху формулировката на моделите и извода на съответните диференциални уравнения, тяхното физическо осмисляне и метод за решение. Моделите се разглеждат с цел решение и използване за симулиране на процесите в реални апарати, което решение да се интегрира в съответния алгоритъм за изчисляване и мащабиране на апарата заедно с необходимите инженерни познания и изчислителни формули за отделните параметри, участващи в модела. Във всяка една от темите, разгледани в учебника, се показва и възможното усъвършенстване и усложняване на модела по отношение влиянието на: неизотермичността (в главата за хомогенни химични реактори); броя и вида на отчитаните механизми на пренос между фазите (при моделите на масообмен през междуфазна повърхност флуид-флуид); структурата на твърдата фаза (при масообмен флуид-твърдо); нелинейността на уравненията (при наличие на нелинейно равновесие, концентрационно зависими коефициенти на дифузия и др.).

Настоящият курс има практическа насоченост с оглед изчисляване и мащабиране на апаратите, а също и теоретична такава, разширявайки погледа на специалиста по инженерна химия върху физическия смисъл на представяните модели и необходимия за решението им математичен апарат. В същото време математичното моделиране е влязло дълбоко в практиката на изследователската работа, включително присъства в темите за дипломни работи като основна или съпътстваща обработката на експеримента част. Не на последно място курсът стъпва върху аналогията на отделните процеси на пренос, развива и обогатява с познания тази постановка.

СЪДЪРЖАНИЕ

Глава I.	НЯКОИ ЕЛЕМЕНТИ НА ТЕОРИЯТА НА ПОДОБИЕТО.	**1 - 1**
Примери	ПРИМЕРИ ЗА ОБЕЗРАЗМЕРЯВАНЕ, ИЗБОР НА МАЩАБИ И ПРИЛОЖЕНИЕ НА ТЕОРИЯТА НА ПОДОБИЕТО.	**1.1 - 2**
Глава II.	ИЗВОД НА МАТЕМАТИЧНИЯ МОДЕЛ. ВИДОВЕ ГРАНИЧНИ УСЛОВИЯ.	**2 - 1**
Глава III.	МАТЕМАТИЧНИ МОДЕЛИ НА ХОМОГЕННИ ХИМИЧНИ РЕАКТОРИ. ЕДНОМЕРНИ МОДЕЛИ – ФОРМУЛИРОВКА.	**3 - 1**
Глава IV.	МЕТОД НА КРАЙНИТЕ РАЗЛИКИ. НЯКОИ МАТЕМАТИЧЕСКИ И ФИЗИЧЕСКИ ВЪПРОСИ НА НЕГОВОТО ПРИЛОЖЕНИЕ. ЧИСЛЕНИ ЕКСПЕРИМЕНТИ С ЕДНОМЕРНИ МОДЕЛИ.	**4 - 1**
Глава V.	МАТЕМАТИЧНИ МОДЕЛИ НА ХОМОГЕННИ ХИМИЧНИ РЕАКТОРИ. ДВУМЕРНИ МОДЕЛИ – ФОРМУЛИРОВКА И РЕШЕНИЕ.	**5 - 1**
Глава VI.	МОДЕЛИ НА КОЛОННИ ЕКСТРАКТОРИ ТЕЧНОСТ-ТЕЧНОСТ.	**6 – 1**
Пример	ПРИМЕР ЗА ИЗЧИСЛЯВАНЕ И МАЩАБИРАНЕ НА КОЛОНЕН ЕКСТРАКТОР ТЕЧНОСТ-ТЕЧНОСТ.	**6 - 19**
Глава VII.	МОДЕЛИ НА МАСООБМЕННИ АПАРАТИ ФЛУИД-ТВЪРДО. МОДЕЛ НА КОЛОНЕН АДСОРБЕР В СЛУЧАЙ НА ЕДНОКОМПОНЕНТНА ИЗОТЕРМИЧНА АДСОРБЦИЯ.	**7 – 1**
Примери	МОДЕЛ НА АДСОРБЦИЯ В БИПОРЬОЗНА ЧАСТИЦА.	**7.1 - 2**
	НЕИЗОТЕРМИЧНА АДСОРБЦИЯ В КОЛОНА С НЕПОДВИЖЕН СЛОЙ – ЕДНОМЕРЕН МОДЕЛ.	**7.1 – 3**
	ДВУМЕРЕН МОДЕЛ НА АДСОРБЕР С НЕПОДВИЖЕН СЛОЙ.	**7.1 – 6**
	ПРИЛОЖЕНИЕ НА МЕТОДА НА КРАЙНИТЕ РАЗЛИКИ КЪМ РЕШЕНИЕ НА ДИФУЗИОННА ЗАДАЧА – ЕКСТРАКЦИЯ ОТ ТВЪРД МАТЕРИАЛ В СЪД С РАЗБЪРКВАНЕ.	**7.1 - 9**

ЛИТЕРАТУРА

I.НЯКОИ ЕЛЕМЕНТИ НА ТЕОРИЯ НА ПОДОБИЕТО

Основите на теория на подобието са изложени подробно в курса по "Процеси и апарати в химическата промишленост”. Тук ще припомним само необходимите за по-нататъшната работа неща. Нека формулираме π-теоремата:

Ако имаме отношение между *m* параметъра от вида

$$f_1(q_1, q_2, q_3, \ldots, q_m) = 0 \qquad (1.1),$$

то може да се намери еквивалентно нему съотношение между *n* безразмерни параметри $f_2(\pi_1, \pi_2, \pi_3, \ldots, \pi_n) = 0$ (1.2),

където числото n се определя като: ***n=m-k*** (1.3)

Общоприето е k да се счита равно на минималния брой независими размерности, необходими за образуването на всички параметри $q_1, q_2, q_3, \ldots, q_m$, както е доказано първоначално от Бъкингам. По-късно Ван Драйст е обобщил този резултат, като е показал, че ако r е минималният брой независими размерности, то:

$$k \leq r \qquad (1.4)$$

като k е най-големият брой параметри от първоначалния списък, които не могат да бъдат обединени в някакъв безразмерен комплекс.

За да се разбере добре смисъла на π-теоремата и нейната практическа стойност ще дадем пояснения на някои понятия и ще приведем условията за нейното прилагане.

Безразмерни ще наричаме тези величини, които са независими спрямо системата на измерване. Ако разглеждаме тръба, за нейната дължина можем да запишем напр. L=1200mm, L=120cm, L=1.2m (в зависимост от използваната мерна единица). Ако използваме, обаче, отношение между дължини, то няма да зависи от мерната система. Такава величина ще бъде отношението между дължината и диаметъра на разглежданата от нас тръба L/d, подобно ще е отношението между максималната и средната скорост в тръбата $w_{\text{ср}} / w_{max}$, в авиацията и космонавткаta подобно е отношението на ускорението спрямо земното и т.н. Могат да бъдат образувани и по-сложни безразмерни комплекси, напр. $\dfrac{w_{cp}}{g.d}, \dfrac{w_{cp} d.\rho}{\mu}$ и т.н.. Общото между всички безразмерни величини е, че те нямат размерност. Това ни дава основание да запишем едно определение:

Безразмерни са тези величини, физически константи, или всяка тяхна комбинация, образувани така, че всички размерности да се съкратят.

Ще приведем накратко условията, които трябва да бъдат изпълнени при използването на π-теоремата:

— в системата безразмерни параметри трябва да влизат всички параметри, имащи физически смисъл, включително всички независими параметри и един зависим;

— всеки параметър, съдържащ се в първоначалния списък, трябва да влиза в безразмерните комплекси поне един път;

— размерностите, използвани за образуване на величините на физическите параметри трябва да бъдат независими, т.е. излишните размерности трябва да бъдат компенсирани.

Да продължим с разглежданата от нас тръба. Освен като геометрично тяло тя ни интересува като част от пространството, в което се движи течност – тръбопровод. Ще определим величините, които влияят върху процеса на транспорт на течността и ще се опитаме да установим вида на функционалната зависимост между тях. От опит е известно, че величините, характеризиращи стационарното, ламинарно течение на вискозна течност в кръгла тръба са падът на налягането Δp, средната скорост w_{cp}, дължината на тръбата L, диаметърът й d, плътността ρ и вискозитета на течността μ. Можем да запишем:

$$f_1(\Delta p, w, L, d, \rho, \mu) \qquad (1.5)$$

От разглеждането на размерностите на шестте параметра в (1.5) следва, че минималният брой независими размерности, от които могат да бъдат образувани тези параметри, е равен на три. В система SI това са маса, дължина и време. Следователно имаме *r*=3. Сега да намерим тези параметри, които не образуват безразмерен комплекс. Само комбинацията от плътност, диаметър и скорост не може да бъде безразмерна, тъй като от тези три параметра само в плътността е включена размерност на маса. Затова можем да заключим, че в дадения случай *k=3=r*.

Тогава съгласно теоремата броят на необходимите безразмерни параметри е

n=m-k; m=6; k=3; n=6-3=3;

Остава да решим въпроса с намирането на тези безразмерни комплекси. Това може да се извърши с добре известната стандартна процедура за анализ на размерностите. Ако сме добре запознати със същността на явлението, можем след внимателен анализ да определим тези параметри. Една от възможните безразмерни зависимости е:

$$f_2\left(\frac{\Delta p}{\frac{1}{2}\rho w^2}, \frac{L}{d}, \frac{w.d.\rho}{\mu}\right) = 0 \qquad (1.6)$$

Трите комплекса са добре известните числа на Ойлер, Рейнолдс и симплексът на геометрично подобие.

По-нататъшният анализ се определя от задачите, които трябва да бъдат решени. Ще разгледаме двете най-често срещани задачи:

— при зададени размери на тръбопровода, разход на флуида (респ. скорост) и свойства, да се определи падът на налягането и подбере транспортиращо съоръжение. Тъй като ние искаме падът на налягането да е зависима променлива, то можем да запишем:

$$\frac{\Delta p}{\frac{1}{2}\rho w^2} = f_3\left(\frac{L}{d}, \frac{w.d.\rho}{\mu}\right) \tag{1.7}$$

Това съотношение е напълно коректно за разглежданата от нас задача. То води до добре известното уравнение на Дарси-Вайсбах.

— при зададени размери на тръбопровода, пад на налягане и свойства на течността да се определи скоростта (разходът) на флуида. От π-теоремата и условията за нейното приложение следва, че да се използват същите безразмерни параметри Eu, Re, Г е некоректно, тъй като неизвестната скорост в този случай би влязла в два безразмерни комплекса. Ще търсим нов безразмерен комплекс, в който участва падът на налягане и отсъства скоростта, като комбинация от числата на Ойлер и Рейнолдс. Тъй като те са безразмерни, всяка комбинация от тях ще бъде също безразмерна. Очевидно е, че, за да се елиминира скоростта, трябва да умножим Eu по Re^2. Можем да запишем:

$$\frac{w.d.\rho}{\mu} = f_4\left(\frac{\Delta p.d^2.\rho}{\mu^2}, \Gamma\right) \tag{1.8}$$

Този резултат бихме могли да получим също така използвайки стандартната процедура от теорията на измеренията. Да провери това предоставяме на читателя.
Както се вижда, в зависимост от конкретната задача, се търси функционална зависимост между различните безразмерни комплекси, избрани между значително по-големия възможен техен набор. Естествено е да поставим въпроса как могат да бъдат определени тези безразмерни комплекси, които да са коректни за дадената задача, и как, използвайки резултатите получени от π-теоремата, можем да извършим мащабен преход. Теорията на измеренията и π-теоремата не са в състояние да дадат отговор на този въпрос. За целта най-добре е да бъде използван методът на подобието. За да приложим теорията на подобието трябва да използваме някои от основните закони при изследване на непрекъснатата среда. Тук изрично трябва да отбележим, че в своето изложение ние ще изхождаме от хипотезата за континуум и няма се спираме на кинетичната теория. Законите, които представляват интерес за нас са:
1) законът за запазване на масата;
2) стехиометричният принцип;
3) вторият закон на Нютон;

4) първият принцип на термодинамиката;
5) уравненията на преноса (законите на Нютон, Фурие, Фик).
В нашата конкретна задача ще използваме втория закон на Нютон, записан във формата на закон за запазване на количеството движение. Нека отделим един конкретен обем от течността V с повърност A. Тогава можем да запишем:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_{(V)}\rho \mathrm{v}_{\mathrm{i}}dV=\int_{(A)}\rho \mathrm{v}_{\mathrm{i}}\mathrm{v}_{\mathrm{r}}dA+\int_{(A)}p.dA+\int_{(A)}\tau.dA+\int_{(V)}\rho g dV$$

I II III IV V

[сили от изменение на количеството движение в контролния обем]=
I
=[сили от пренос на количество движение с потока - инерционни] +
II
+ [сили от изменение на налягането в контролния обем]+
III
+[сили от вискозно напрежение в контролния обем] +
IV
+[сили на гравитацията в контролния обем] +
V

Тук $\mathrm{v_i}$ е скоростта в произволна координатна система; $\mathrm{v_r}$–относителната скорост на граничната повърхност на контролния обем; p–налягане;
τ–напрежение; ρ–плътност; t–време;
След като приложим теоремата на Гаус-Остроградски и закона за връзката между вискозните напрежения и скоростта на деформация, ще получим известното уравнение на Навие-Стокс:

$$\frac{\partial(\rho \mathrm{v}_{\mathrm{i}})}{\partial t}+\nabla(\rho \mathrm{v}_{\mathrm{i}}\mathrm{v}_{\mathrm{r}})=-\nabla p+\mu\nabla^2 v+\rho g \qquad (1.9)$$

В случай, че през контролния обем минава фазова повърхност, разделяща две фази (двуфазен поток), трябва да включим в (1.9) член, отчитащ силите на повърхностно напрежение. Нека се заемем с анализа на съотношенията между силите в горното уравнение и по-точно между техните мащаби. В случая на течение в тръба за мащабите на силите имаме:

– инерционна сила $F_i \approx \rho w^2 d^2$;

– вискозна сила $F_v \approx \mu \frac{w}{d} d^2$;

– сила на налягането $F_p \approx \Delta p . d^2$;

– сила на теглото $F_g \approx \rho g . d^3$;

– сила на повърхностно напрежение $F_\sigma \approx \sigma.d$;

– сила от изменение на количеството движение в контролния обем $F_t \approx \dfrac{\rho\ w\ d^3}{t}$;

Табл.1 представя отношенията на силите. Трябва да се има предвид, че ако в конкретен процес дадена сила отсъства, характерен съответен мащаб също ще отсъства.

Табл.1

$F_t \approx \dfrac{\rho w d^3}{t}$	$F_v \approx \mu \dfrac{w}{d} d^2$	$F_g \approx \rho g.d^3$	$F_\sigma \approx \sigma.d$
$\dfrac{F_t}{F_i} = \dfrac{d}{t.w}$ число на Струхал	$\dfrac{F_i}{F_v} = \dfrac{\rho w.d}{\mu}$ число на Рейнолдс	$\dfrac{F_i}{F_g} = \dfrac{w^2}{g.d}$ число на Фруд	$\dfrac{F_i}{F_\sigma} = \dfrac{\rho w^2 d}{\sigma}$ число на Вебер
		$\dfrac{F_g}{F_v} = \dfrac{\rho d^2 g}{\mu w}$	$\dfrac{F_\sigma}{F_v} = \dfrac{\sigma}{\mu.w}$
		$\dfrac{F_g}{F_p} = \dfrac{\rho.d.g}{\Delta p}$	$\dfrac{F_\sigma}{F_p} = \dfrac{\sigma}{\Delta p.g}$
			$\dfrac{F_g}{F_\sigma} = \dfrac{\rho.g.d^2}{\sigma}$

Както се вижда, безразмерните комплекси в таблицата представляват добре известните ни числа на хидродинамично подобие, които ние получаваме от уравненията за движение чрез тяхното преобразуване в безразмерен вид – нормализация, която се извършва по следната методика:

– преобразуват се всички променливи в безразмерен вид, избирайки съответните мащаби;

– разделя се цялото уравнение на единия от коефициентите на така полученото уравнение, за да бъде то направено безразмерно. Съвпадението на числата на подобие се дължи на факта, че самите уравнения (1.9) представляват баланс на силите, действащи върху обема на течността. Следователно, за да осигурим подобие на теченията на флуидите, е необходимо да осигурим подобие на силите, както в геометрията осигуряваме подобие на линейните размери на телата (постоянство на техните отношения). Подобие на силите, както следва от Табл.1, се осигурява от равенството на числата на подобие, което гласи, че: