PROCESY
S PRESTUPOM LÁTKY

SYSTÉMY SO SPOJITO ROZLOŽENÝMI PARAMETRAMI

NÁPLŇOVÁ REKTIFIKAČNÁ KOLÓNA

Dynamický matematický model (DMM)

Zjednodušujúce predpoklady pre odvodenie DMM náplňovej rektifikačnej kolóny:

- delí sa binárna zmes
- opíšeme len hlavnú časť kolóny, ktorú predstavuje valcová nádoba naplnená keramickými telieskami (DMM model varáka a kondenzátora je ako v rektifikačnej kolóne)
- nástrek sa privádza do kolóny ako kvapalina zohriata na bod varu a vstupuje do vrchnej časti kolóny (na hlavu)
- zanedbávame tepelnú bilanciu rektifikácie (t.j. sú splnené podmienky pre jej zanedbanie) a dej je izotermický
- zanedbávame straty tlaku

- skutočné zloženie kvapalnej fázy sa nerovná rovnovážnemu zloženiu kvapalnej fázy, t.j. x K x^*
- skutočné zloženie parnej fázy sa nerovná rovnovážnemu zloženiu kvapalnej fázy, t.j. y K y^*
- zádrže kvapalnej fázy v kolóne Z_L/V [mol.m^{-3}] (alebo Z_L/l [mol.m^{-1}]) definované na jednotku objemu (alebo jednotku dĺžky) kolóny sú konštantné
- zádrže parnej fázy v kolóne Z_V/V (alebo Z_V/l) definované na jednotku objemu (alebo jednotku dĺžky) kolóny sú konštantné

- tok látkového množstva parnej fázy pozdĺž celej kolóny je rovnaký pozdĺž celej kolóny
- tok látkového množstva kvapalnej fázy pozdĺž celej kolóny je rovnaký pozdĺž celej kolóny
- parná aj kvapalná fáza prúdia kolónou ideálnym piestovým tokom
- k prestupu látky dochádza pri konštantnom tlaku – tlak pozdĺž kolóny je konštantný
- koeficienty prestupu látky aj v kvapalnej ($K_x a$) [$mol.m^{-3}s^{-1}$] aj v parnej fáze ($K_y a$) [$mol.m^{-3}s^{-1}$] sú konštantné

Dynamický matematický model - všeobecne

DMM tvorí:

- materiálová bilancia zložky v kvapalnej fáze
- materiálová bilancia zložky v parnej fáze
- rovnica prestupu látky (v kvapalnej a parnej fáze)
- rovnica rovnovážnej závislosti (krivky)

Dynamický matematický model sa získa bilanciou elementu kolóny o dĺžke dz.

Kvapalná fáza vstupuje do kolóny na jej začiatku a parná fáza na jej konci.

Kolóna (jej hlavná časť naplnená keramickými telieskami) má dĺžku *l*.

Dynamický matematický model

- Materiálová bilancia prchavejšej (=nižšie vriacej) zložky v kvapalnej fáze

$$\dot{n}_L x(z,t) = \dot{n}_L \left[x(z,t) + \frac{\partial x(z,t)}{\partial z} \mathrm{d}z \right] + \frac{\dot{n}}{V}(z,t)\mathrm{d}V + \frac{\partial \left[\frac{Z_L}{V} \mathrm{d}V x(z,t) \right]}{\partial t}$$

Na jej riešenie potrebujeme 2 typy podmienok:

1. začiatočnú: $x(z, t_0 = 0) = x(z,0) = x^s(z)$
2. okrajovú: $x(z = 0, t) = x(0, t) = x_0(t)$

- Materiálová bilancia prchavejšej zložky v parnej fáze

$$\dot{n}_V\left[y(z,t)+\frac{\partial y(z,t)}{\partial z}\mathrm{d}z\right]+\quad \frac{\dot{n}}{V}(z,t)\mathrm{d}V=\quad \dot{n}_V\,y(z,t)+\frac{\partial\left[\frac{Z_V}{V}\mathrm{d}Vy(z,t)\right]}{\partial t}$$

Na jej riešenie potrebujeme 2 typy podmienok:

1. začiatočnú: $y(z,t_0=0)=y(z,0)=y^s(z)$

2. okrajovú: $y(z=l,t)=x(l,t)=x_n(t)$

- Rovnica prestupu látky

$$\frac{\dot{n}}{V}(z,t) = (K_x a)\left[x(z,t) - x^*(z,t)\right] = (K_y a)\left[y^*(z,t) - y(z,t)\right]$$

- Rovnica rovnovážnej krivky

$$y^*(t) = f\left(x^*(t)\right)$$

napr.

$$y^*(z,t) = \frac{a + bx^*(z,t) + cx^*(z,t)^2}{1 + dx^*(z,t) + ex^*(z,t)^2}$$

DMM etážovej rektifikačnej kolóny má tvar nelineárneho stavového opisu v tvare 2 parciálnych DCR a 2 algebraických rovníc s nenulovými začiatočnými a okrajovými podmienkami podmienkami, kde:

- stavové veličiny: $x(z,t), y(z,t)$
- vstupné veličiny: $x(z=0,t), y(z=l,t)$
- výstupné veličiny napr.: $x(z=l,t), y(z=0,t)$

Linearizácia

Predpokladáme, že v pracovnej oblasti môžeme nelineárnu rovnovážnu závislosť linearizovať, t.j. aproximovať rovnicou priamky (napr. lineárnou regesiou z tabuľkových dát):

$$y^* = k_1 x^* + k_2$$

Túto rovnicu použijeme na to, aby sme rovnicu prestupu látky vyjadrili len pomocou skutočných (reálnych) mólových zlomkov prchavejšej zložky namiesto rovnovážnych (ideálnych).

- Rovnica prestupu látky po dosadení za y^*:

$$\frac{\dot{n}}{V}(z,t) = (K_x a)\left[x(z,t) - x^*(z,t)\right] = (K_y a)\left[k_1 x^*(z,t) + k_2 - y(z,t)\right]$$

- Robíme úpravy vedúce k vyjadreniu $x^*(z,t)$:

$$(K_x a)[x(z,t) - x^*(z,t)] = (K_y a)[k_1 x^*(z,t) + k_2 - y(z,t)]$$

$$(K_x a)x(z,t) - (K_x a)x^*(z,t) = (K_y a)k_1 x^*(z,t) + (K_y a)k_2 - (K_y a)y(z,t)$$

$$(K_x a)x(z,t) - (K_y a)k_2 + (K_y a)y(z,t) = (K_y a)k_1 x^*(z,t) + (K_x a)x^*(z,t)$$

$$x^*(z,t) = \frac{(K_x a)x(z,t) - (K_y a)k_2 + (K_y a)y(z,t)}{(K_y a)k_1 + (K_x a)}$$

- dosadíme za $x^*(z,t)$ opäť do rovnice prestupu látky:

$$\frac{\dot{n}}{V}(z,t) = (K_x a)[x(z,t) - x^*(z,t)] =$$

$$= \left(K_x a\right)\left[x(z,t) - \frac{\left(K_x a\right) x(z,t) - \left(K_y a\right) k_2 + \left(K_y a\right) y(z,t)}{\left(K_y a\right) k_1 + \left(K_x a\right)} \right] =$$

$$= \left(K_x a\right)\left[\frac{\left(K_y a\right) k_1 x(z,t) + \left(K_x a\right) x(z,t) - \left(K_x a\right) x(z,t) + \left(K_y a\right) k_2 - \left(K_y a\right) y(z,t)}{\left(K_y a\right) k_1 + \left(K_x a\right)} \right] =$$

$$= \frac{\left(K_x a\right)\left(K_y a\right)}{\left(K_y a\right) k_1 + \left(K_x a\right)} \left[k_1 x(z,t) + k_2 - y(z,t) \right] =$$

$$= \left(K_{xy} a\right)\left[k_1 x(z,t) + k_2 - y(z,t) \right] = \quad \frac{\dot{n}}{V}(z,t)$$

- odvodenú rovnicu prestupu látky dosadíme do materiálových bilancií zložiek v kvapalnej a plynnej fáze a dostaneme linearizovaný DMM náplňovej rektifikačnej kolóny:

$$\dot{n}_L x(z,t) = \dot{n}_L \left[x(z,t) + \frac{\partial x(z,t)}{\partial z} \mathrm{d}z \right] + (K_{xy} a)[k_1 x(z,t) + k_2 - y(z,t)] \mathrm{d}V + \frac{\partial \left[\frac{Z_L}{V} \mathrm{d}V x(z,t) \right]}{\partial t}$$

$$\dot{n}_V \left[y(z,t) + \frac{\partial y(z,t)}{\partial z} \mathrm{d}z \right] + (K_{xy} a)[k_1 x(z,t) + k_2 - y(z,t)] \mathrm{d}V = \dot{n}_V y(z,t) + \frac{\partial \left[\frac{Z}{V} \mathrm{d}V y(z,t) \right]}{\partial t}$$

\+ už uvedené začiatočné a okrajové podmienky

Definovanie časových konštánt a rýchlostí prúdenia

$$\frac{Z_L}{V}\mathrm{d}V\frac{\partial x(z,t)}{\partial t}+\dot{n}_L(t)\mathrm{d}z\frac{\partial x(z,t)}{\partial z}=\left(K_{xy}a\right)\mathrm{d}V\left[-k_1x(z,t)-k_2+y(z,t)\right]$$

$$\frac{Z_V}{V}\mathrm{d}V\frac{\partial y(z,t)}{\partial t}-\dot{n}_V(t)\mathrm{d}z\frac{\partial y(z,t)}{\partial z}=\left(K_{xy}a\right)\mathrm{d}V\left[k_1x(z,t)+k_2-y(z,t)\right]$$

- po zavedení:

$$T_x=\frac{\frac{Z_L}{V}}{\left(K_{xy}a\right)k_1}\qquad T_y=\frac{\frac{Z_V}{V}}{\left(K_{xy}a\right)}$$

- a úprave:

$$\frac{\dot{n}_L\mathrm{d}z}{\left(K_{xy}a\right)\mathrm{d}Vk_1}=\frac{\dot{n}_L\mathrm{d}z}{\left(K_{xy}a\right)S\mathrm{d}zk_1}\frac{\frac{Z_L}{V}}{\frac{Z_L}{V}}=T_x\frac{\dot{n}_L}{S\frac{Z_L}{V}}=T_xw_x$$

$$\frac{\dot{n}_V \mathrm{dz}}{(K_{xy}a)\mathrm{d}V} = \frac{\dot{n}_V \mathrm{dz}}{(K_{xy}a)\mathrm{Sdz}} \frac{\frac{Z_V}{V}}{\frac{Z_V}{V}} = T_y \frac{\dot{n}_V}{S\frac{Z_V}{V}} = T_y w_y$$

- dostaneme:

$$T_x \frac{\partial x(z,t)}{\partial t} + \quad T_x w_x(t) \frac{\partial x(z,t)}{\partial z} = \quad -x(z,t) - \frac{k_2}{k_1} + \frac{1}{k_1} y(z,t)$$

$$T_y \frac{\partial y(z,t)}{\partial t} - \quad T_y w_y(t) \frac{\partial y(z,t)}{\partial z} = \quad k_1 x(z,t) + k_2 - y(z,t)$$

+ už uvedené začiatočné a okrajové podmienky

Riešenie rovnovážneho stavu pre danú kolónu

- MMRS:

$$T_x w_x \frac{\mathrm{d}x^s(z)}{\mathrm{d}z} = \quad -x^s(z) - \frac{k_2}{k_1} + \frac{1}{k_1} y^s(z)$$

$$T_y w_y \frac{\mathrm{d}y^s(z)}{\mathrm{d}z} = \quad k_1 x^s(z) + k_2 - y^s(z)$$

- + 2 okrajové podmienky:

$$x^s(z=0) = x_0{}^s$$

$$y^s(z=l) = y_n{}^s$$