حل عمومی مسائل جداسازی درسیستمهای چند واحدی با جریانهای معکوس

نوشتهٔ :

مرتضی سهرابی **طاهرهٔ کاغذچی**

استادیاران دانشکدهٔ صنعتی (پلی‌تکنیک تهران) انستیتو مهندسی شیمی و پتروشیمی

چکیده :

بطورکلی مشخصات هرفرایند جداسازی راکه درچندین واحد و با جریان معکوس صورت گیرد میتوان بشکل معادلات غیرخطی بیان کرد . محاسبهٔ این روابط درحالت کلی که محتوی تعداد زیادی مشتقات جزئی هستند طولانی‌است ولی درغالب موارد با درنظرگرفتن شرایط قابل قبولی میتوان آنهارا ساده تر نمود.

دراین مقاله روش بدست آوردن معادلات مبین سیستمهای مذکور و نیز چگونگی خلاصه کردن آنها شرح داده شده وهمچنین اجزاء برنامهٔ لازم برای استفاده از حسابگرهای الکترونیکی درحل این قبیل‌مسائل تشریح گردیده است .

مقدمه : حل هرنوع مسئله مربوط به جداسازی (Separation) درسیستمهای چند واحدی نیاز به برقراری بیلانهای مواد و حرارت ودانستن شرایط تعادل درهرواحد فرایند دارد. معادلاتی که سیستمهای چند واحدی با جریان معکوس را مشخص میکنند معمولاً غیرخطی هستند. تا بحال برنامه های کامپیوتری متعددی برای حل این قبیل معادلات پیشنهاد گردیده است که متأسفانه کلیه آنها بجز دو روش θ و Relaxation (۲) و (۱) که مورداستعمال بیشتری دارند ، تنها دربعضی از موارد و شرایط عمل خاص صادق میباشند (۷)–(۳) درسالهای اخیر Duffin و Nenerell (۸) نشان داده‌اند که با تغییرات جزئی دربرنامهٔ اصلی روش θ میتوان دامنهٔ کاربرد آنرا وسیعتر ساخت . ولی باید دانستکه حتی دراین روش در صورتیکه حدس اولیه برای توزیع درجه حرارت در واحدهای دستگاه بمقدار حقیقی آنها نزدیک نباشد تعداد دفعات تکرار برنامه محاسبات بسیار زیاد خواهد بود (۹) .

دراین مقاله کوشش شده است تا فرضیات و شرایط لازم برای محاسبات سیستمهای چند واحدی جریان معکوس را مشخص نموده و یک راه حل مشترك برای این قبیل مسائل بدست دهیم .

اساس یک راه حل مشترك از دو قسمت تشکیل میشود :

۱ : روش تشریح فرایند و مسائل وابسته بدان

۲ : راه حل عمومی معادلات حاصل

تشریح مسئله

ابتداء راه حل مشترك را درمورد حالت سادهای بکار برده و سپس نشان‌میدهیم که چگونه میتوان ازهمین روش درحل مسائل پیچیده‌تر نیز استفاده کرد .

حالت ساده را ستون جدا کنندهای (fractionating column) با n واحد درنظر میگیریم که از مخلوطی مرکب از m سازنده تغذیه میشود . واحدهای دستگاه را ایده‌آل تصور کرده و بعلاوه فازهای بخار و مایع خروجی از هرواحد را درحال تعادل با یکدیگر فرض می‌نمائیم . همچنین یک مایع کنندهٔ جزئی (Partial condenser) که آنرا نیز میتوان یک واحد ایده‌آل دانست درنظر میگیریم . باین ترتیب با n واحد تعادلی که p جریان مایع و q جریان بخار ازآنها عبور میکنند سروکار خواهیم داشت . خوراك اصلی وارد یک‌واحد دلخواه برج‌میشود ونیز درضمن این عمل‌ممکنست مقداری‌حرارت گرفته شده ویا اضافه گردد .

شکل (۱) یک ستون ۹ واحدی را که تنها یک جریان خوراك در واحد پنجم آن داخل میشود نشان میدهد . مشخصات خوراك بوسیله ترکیب و انتالپی سازندگان آن مشخص میشود . تمام جریانهای موجود را علامت‌گذاری میکنیم .

معادلات فرایند

بیلان مواد دراطراف واحد j ام برج بشکل زیر نوشته میشود :

(واحد زمان) / (مجموع مولهای خروجی) — (واحد زمان) / (مجموع مولهای‌ورودی ازسایر واحدها)

$$+F_j=0 \qquad (1)$$

درمعادلهٔ (۱) F_j شدت جریان خوراك ورودی در واحد زمان به واحد j ام است .

بنابراین برای تمام ستون میتوانیم n معادله که ممکنست آنها را بشکل‌ماتریس نشان داد برقرار نمائیم . این معادلات برای حالت خاص موردنظر بصورت معادلهٔ (۲) نوشته میشوند :

$$
\left[\begin{array}{ccccccccccc}
-1 & 1 & & & & & & & & & \\
& -1 & 1 & & & & & & & & \\
& & -1 & 1 & & & & & & & \\
& & & -1 & 1 & & & & & & \\
& & & & -1 & 1 & & & & & \\
& & & & & -1 & 1 & & & -1 & \\
& & & & & & -1 & 1 & & & \\
& & & & & & & -1 & 1 & & \\
& & & & & & & & -1 & 1 &
\end{array}\right]
\left[\begin{array}{c}
L_1 \\ L_2 \\ L_3 \\ L_4 \\ L_5 \\ L_6 \\ L_7 \\ L_8 \\ L_9 \\ L_{10} \\ L_{11}
\end{array}\right] +
$$

$$
\left[\begin{array}{cccccccccc}
-1 & & & & & & & & & \\
1 & -1 & & & & & & & & \\
& 1 & -1 & & & & & & & -1 \\
& & 1 & -1 & & & & & & \\
& & & 1 & -1 & & & & & \\
& & & & 1 & -1 & & & & \\
& & & & & 1 & -1 & & & \\
& & & & & & 1 & -1 & & \\
& & & & & & & 1 & -1 & \\
& & & & & & & & 1 & -1
\end{array}\right]
\left[\begin{array}{c}
V_1 \\ V_2 \\ V_3 \\ V_4 \\ V_5 \\ V_6 \\ V_7 \\ V_8 \\ V_9 \\ V_{10}
\end{array}\right] +
\left[\begin{array}{c}
0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ F \\ 0 \\ 0 \\ 0
\end{array}\right] = 0
$$

یا :

$$A_1 l + A_2 v + f = 0 \qquad (۲)$$

که در رابطهٔ (۲) :

A_1 و A_2 بترتیب عبارتند از $n \times p$ و $n \times q$ ماتریس

l عبارتست از $p \times 1$ بردارکه مشخص‌کنندهٔ تمام جریانهای مایع باستثنای خوراك اصلی‌هستند

v عبارتست از $q \times 1$ بردار مشخص‌کنندهٔ جریانهای بخار باستثنای خوراك

و f عبارتست از $n \times 1$ بردارکه مبین شدت جریان خوراك ورودی به ستون میباشند .

بیلان جرمی هرسازنده ، i ، را بشکل مشابهی میتوان بدست آورد :

$$
\begin{bmatrix}
-L_1L_2 & & & & & & & & \\
& -L_2L_3 & & & & & & & \\
& & -L_3L_4 & & & & & & \\
& & & -L_4L_5 & & & & & \\
& & & & -L_5L_6 & & & & \\
& & & & & -(L_6+L_{11})L_7 & & & \\
& & & & & & -L_7L_8 & & \\
& & & & & & & -L_8L_9 & \\
& & & & & & & & -(L_9+L_{10})
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} x_{i1} \\ x_{i2} \\ x_{i3} \\ x_{i4} \\ x_{i5} \\ x_{i6} \\ x_{i7} \\ x_{i8} \\ x_{i9} \end{bmatrix}
+
$$

$$
\begin{bmatrix}
-V_1 & & & & & & & & \\
& V_1-V_2 & & & & & & & \\
& & V_2-(V_3+V_{10}) & & & & & & \\
& & & V_3-V_4 & & & & & \\
& & & & V_4-V_5 & & & & \\
& & & & & V_5-V_6 & & & \\
& & & & & & V_6-V_7 & & \\
& & & & & & & V_7-V_8 & \\
& & & & & & & & V_8-V_9
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} y_{i1} \\ y_{i2} \\ y_{i3} \\ y_{i4} \\ y_{i5} \\ y_{i6} \\ y_{i7} \\ y_{i8} \\ y_{i9} \end{bmatrix}
+
\begin{bmatrix} \\ \\ \\ \\ f_i \\ \\ \\ \\ \\ \end{bmatrix}
= 0
$$

یا :

$$B_1x_i+B_2y_i+f_i=0 \qquad (۳)$$

بدیهی است ضرائب B_1 و B_2 برای تمام سازندگان یکسان خواهند بود .

درمورد یک واحد ایده‌آل داریم :

$$y_{i,j}=K_{ij}\,x_{ij} \qquad (٤)$$

که :

$$K_{ij}=fn(T_j\,,\,P_j\,,\,x_{1j}\,,\,x_{2j}\,,\,\dots\,,\,x_{mj})$$

برای سادگی مطلب فرض میکنیم که K_{ij} فقط تابع دما بوده و فشار درتمام دستگاه ثابت است. بنابراین ازمعادلات (۳) و (٤) نتیجه میشود :

$$B_1x_i+B_2K_i\,x_i+f_i=0 \qquad (۵)$$

که K_i یک ماتریس قطر بوده و از K_{ij} تشکیل‌شده است.

معادله (٥) را بصورت زیر میتوان نوشت :

$$(B_1+B_2K_i)x_i+f_i=o$$

یا :

$$C_ix_i+f_i=o \qquad (٦)$$

از معادلهٔ (٦) مقدار x_i محاسبه میشود :

$$x_i=-C_i^{-1}f_i \qquad (٧)$$

معادله‌ای مشابه با رابطهٔ (٧) برای هرسازنده بدست می‌آید بعلاوه میدانیم مجموع مولهای جزئی سازندگان هرفاز موجود درهرسینی برابر واحد میباشد . یعنی :

$$\sum_{i=1}^{m} x_i=u \qquad (٨)$$

$$\sum_{i=1}^{m} K_i x_i=u \qquad (٩)$$

که u برداریکه است (unit matrix)

بیلان انرژی درهرواحد را نیز بایـد محاسبه نمود و این عمل منجر به حصول معادله‌ای نظیر (٣) میگردد :

$$B_1h+B_2H+Q=o \qquad (١٠)$$

درمعادلـه (١٠) : h عبارت از $n\times 1$ بردار است کـه مبین انتالپی‌هـای مایعات میباشند و H عبارت از $n\times 1$ بردار مشخص کنندهٔ انتالپی‌های بخار و Q نیز برابر $n\times 1$ بردار مبین حرارتهای تبادل شده بین واحدهای برج و محیط خارج است که البته مقادیر q_r (حرارت جوش‌آور) و q_F (گرمای خوراك ورودی) بآن اضافه شده و مقدار q_c (گرمای آزاد شده درمایع کننده) ازآن کسر گردیده است .

$$h_j=fn'\,[T_j\,,\,P_j\,,\,i^m(x_{ij})]$$

که : $$i^m(x_{ij})\equiv x_{1j}\,,\,x_{2j}\,,\,x_{3j}\,,\,\ldots\,,\,x_{mj}$$

$$H_j=fn''\,[T_j\,,\,P_j\,,\,i^m(x_{ij})]$$

معادلاتی راکه تا بحال حاصل شده‌اند در دنبال یکدیگر می‌نویسیم :

n معادله $$A_1\,l+A_2v+f=o \qquad (٢)$$

mn معادله $$y_{ij}=k_{ij}\,x_{ij} \qquad (٤)$$

$$C_i x_i = f_i \qquad \text{معادله } mn \tag{٦}$$

$$\sum_{i=1}^{m} x_i = u \qquad \text{معادله } n \tag{٨}$$

$$\sum_{i=1}^{m} y_i = u \qquad \text{معادله } n \tag{٩}$$

$$B_1 h + B_2 H + Q = 0 \qquad \text{معادله } n \tag{١٠}$$

معادلات فوق درهرفرایند چند واحدی با فرض حالت تعادل صادق میباشند .

بیلان کلی مواد با استفاده از معادلات (٤) و (٦) و (٧) و (٩) بدست میآیـد و درنتیجه معادلـهٔ (٢) را میتوان کنارگذارد . ولی درحل این‌نوع مسائل ساده‌تراست که معادلهٔ (٢) را نگاهداشته ومعادلهٔ (٩) را حذف نمود که درآنصورت تنها با فازهای مایع سروکار خواهیم داشت .

ازمعادلات (٢) و (٤) و (٦) و (٧) و (١٠) رویهمرفته $n(2m+3)$ رابطه حاصل خواهند شد ولی تعداد کل متغیرهای سیستم با فرض ثابت بودن فشار واحدها و بردار مربوط به خوراك جمعاً $n(2m+2)+p+q$ است که عبارتند از :

n متغیر	:	t دمای واحدها
n متغیر	:	q حرارت داده شده به هرواحد
mn متغیر	:	x_i ترکیب فاز مایع درهرواحد
mn متغیر	:	y_i ترکیب فاز بخار درهرواحد
p متغیر	:	l جریان فاز مایع
q متغیر	:	v جریان فاز بخار
$n(2m+2)+p+q$	:	جمع کل

باین ترتیب چون فقط $n(2m+3)$ معادلـه درمقابـل $n(2m+2)+p+q$ متغیر وجـود دارد ، تعداد $(p+q-n)$ درجه آزادی دراین سیستم موجود خواهد بـود و بنابراین برای مشخص کردن کامل سیستم به $p+q-n$ معادلهٔ دیگر احتیاج داریم .

معادلات مشخصه

تعداد $p+q-n$ معادلـه لازم دیگر (کـه مشخصات ثابت سیستم را بدست میدهند) معمولاً با توجه به شدت انتقال حرارت و جرم بین سیستم و محیط خارج حاصل میشوند . بدلیل آنکه ما یک حالت

ساده‌را درنظر گرفته‌ایم ، منطقی‌است که از حرارتهای تلف شده درسینی‌ها صرفنظر نمائیم وباین ترتیب $n-2$ معادله که تمام اجزاء بردار Q معادلهٔ (۱۰) را باستثنای دوجزء مشخص‌می‌نماید بدست می‌آوریم . مثلاً درمورد ستون جداکنندهٔ مورد بحث خواهیم داشت :

$$(Q_2 , Q_3 , Q_4 , Q_5 , Q_6 , Q_7 , Q_8)=(0 , 0 , 0 , Q_F , 0 , 0 , 0) \qquad (۱۱)$$

[واضحست که جریانهای L_{11} , L_{10} , L_1 در دمای نقطهٔ شروع جوشش (bubble point) وجریانهای V_9 و V_{10} در دمای نقطهٔ شبنم (Dew point) از دستگاه خارج میشوند]

بنابراین لازمست تعداد $p+q-2n+2$ معادلـهٔ مشخصهٔ دیگـر را تعیین نمود که البته این معادلات باید از یکدیگر مستقل باشند . این روابط ممکنست ترکیب خوراك ورودی ، شدت جریان مواد و یا حرارت را مشخص نمایند و یا درصورتیکه کنترل فرایند موردنظر باشد یکی ازآنها ممکنست شرایط لازم را برای آنکه دما دریک سینی معین ثابت بماند بیان نماید . همچنین میتوان روابط موجود بین متغیرها را نیز درنظر گرفت . مثلاً لازمهٔ ثابت ماندن جریان برگشتی (Reflux) عبارتست از :

$$L_n - R_1 V_{n-1} = 0$$
$$L_n - R_2 L_{n+1} = 0 \qquad (۱۲)$$

باید دقت شود کـه معادلات مشخصه بطور غیرمستقیم شرایط غیرممکنی را به سیستم تحمیل ننمایند مثلاً Q_R و L_{10} را نباید بوجهی درنظر گرفت که جوش‌آور نتواند شدت جریان موردنظر محصولات سبکتر برج را تأمین نماید .

حل معادلات

با افزودن معادلات مشخصه به معادلات قبلی ، روابط لازم برای محاسبه سیستم حاصل خواهند شد . درعمل کافیست که معادلات مشخصه را بشکل کلی زیر نشان دهیم :

$$M\Phi = v \qquad (۱۳)$$

درمعادلهٔ فوق M یک‌ماتریس‌مربع، Φ بردار وابسته به متغیرهای سیستم و v یک بردارمعلوم دیگراست. درنتیجه خواهیم داشت :

$$\Phi = M^{-1} v \qquad (۱٤)$$

دراینجا بردار v را میتوان یک متغیر عمومی (general variable) دانست .

بجز درحالات بسیار خاص (مثلاً دراستخراج مایع ازمایع با یک حلال کاملاً نیامیزنده وضریب توزیع ثابت Constant distribution coefficient) اجزاء M توابعی از اجزاء Φ خواهند بود . در

تحت این شرایط برای حل مسئله ناچار باید بروش تکرار برنامهٔ محاسبات متوسل شد ولی اشکال کار درآنستکه درمحاسبات مربوطه نباید ناپایداری ایجاد شود و بعلاوه لازمست تا بیک تقارب سریع نیز دست یابیم . درچنین مواردی است که روش تقارب θ ارزش فراوان می‌یابد .

حل معادلات فرایند

درمثال سادهٔ مورد بحث فرض میشود که روابط تعادلی و انتالپی‌های ملکولی مستقل ازکمیت نسبی (Composition) مواد موجود در واحدها بوده وبعلاوه بتوان آنها را بشکل توابعی از دمای واحدها نشان داد . (فشار ثابت است)

$$K_{ij}=fn_i(T_j)_P$$

$$h_j=fn'''(T_j)_P$$

$$H_j=fn''''(T_j)_P$$

دراین حالت ضرائب ماتریسهای B_1 ، B_2 و C_i توابعی از جریانهای خروجی مایع و بخار از سینی‌های برج و نیز دمای سینی‌ها هستند .

روش حل مسئله باین ترتیب است که ابتدا مقادیری برای بردارهای l و v و t و Q فرض نمائیم . برخی از اجزاء این بردارها را میتوان بتوسط معادلات مشخصه و بقیه آنها را بوسیلهٔ بیلان کلی مواد (معادلهٔ ۲) بیان نمود .

با استفاده از مقادیر مفروض برای بردارهای l , v , t ، ترکیب فازمایع ازمعادلهٔ (۷) حاصل خواهد شد ولی دراین حال ممکنست مجموع مقادیر x_i درهرسینی برابر واحد نگردد و باین دلیل برداری مانند α درنظر میگیریم که مبین خطای حاصل باشد .

$$\alpha=u-\sum_{i=1}^{m} x_i \qquad (۱۰)$$

بهمین ترتیب بردار دیگری نیز مثل β فرض میکنیم که نشان دهندهٔ خطای موجود دربیلان حرارت باشد :

$$\beta=B_1h+B_2H+Q \qquad (۱۶)$$

متغیرهای مفروض l و v و t و Q باید طوری تنظیم شوند که شرایط زیر درموردآنها صدق نماید :

$$\alpha=o \qquad \beta=o$$

درعمل محاسبات آنقدر ادامه می‌یابد که شرایط فوق با تقریب بسیارکوچکی برقرار شوند .

فرض میکنیم که خطای موجود در α و β برابر α_o و β_o و تغییرات مقادیر مفروض مساوی Δl ، Δv ، Δt و ΔQ باشند وتغییرات حاصل درترکیب مواد را به Δx_1 ، Δx_2 و $\cdots$ Δx_m نشان‌میدهیم .
هرگونه تغییر در شدت جریان ، باید از بیلان کلی مواد پیروی نماید . بنابراین :

$$A_1\Delta l+A_2\Delta v=o \tag{۱۷}$$

برای آنکه α برابر صفر شود لازمست که :

$$\Delta\alpha=-\alpha_o$$

یا برطبق معادلهٔ (۱۰) :

$$\sum_{i=1}^{m} \Delta x_i=\alpha_o \tag{۱۸}$$

این عبارت بتوسط معادلـهٔ (۶) به متغیرهای سیستم وابسته است و ما ازاین معادله نسبت به متغیر عمومی سیستم ζ (که مبین t_j و v_j و یا l_j باشد) مشتق میگیریم :

$$\frac{\partial C_i}{\partial\zeta}x_i+C_i\frac{\partial x_i}{\partial\zeta}=o$$

بنابراین :

$$\frac{\partial x_i}{\partial\zeta}=C_i^{-1}\frac{\partial C_i}{\partial\zeta}x_i \tag{۱۹}$$

ازمعادلهٔ (۱۹) برای بدست آوردن مشتقات جزئی x_i نسبت به اجزاء l , v , t میتوان استفاده کرد .

با در دست داشتن مشتقات جزئی با استفاده از روش Newton – Raphson میتوان تصحیحات لازم را درهرتکرار برنامه اعمال نمود . فرض میکنیم معادله‌ای بصورت زیر داشته باشیم :

$$\Phi=fn(v_1 , v_2 , \cdots , v_n)$$

آنرا بروش تیلور بسط میدهیم :

$$\Phi_o+\Delta\Phi=fn'(v_1 , v_2 , \cdots v_n)_o+\sum_{j=1}^{n} \Delta v_j \left(\frac{\partial\Phi}{\partial v_j}\right)_o+$$
$$\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n} \Delta v_j \sum_{i=1}^{n} \Delta v_i \left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial v_j\partial v_i}\right) \tag{۲۰}$$

اندیس o مربوط بمقادیر متغیرها درشرایط اولیه است .

اگر جملهٔ $\Delta v_i \left(\frac{\partial \Phi}{\partial v_i}\right)_o$ از سایر عبارات خیلی بزرگتر باشد خواهیم داشت :

$$\Delta \Phi \approx \sum_{j=1}^{j=n} \Delta v_j \left(\frac{\partial \Phi}{\partial v_j}\right)_o \qquad (۲۱)$$

و باین ترتیب میتوانیم بنویسیم :

$$\mu \Delta v = \Delta \Phi$$

درنتیجه مقدار تصحیح Δv را با استفاده از رابطهٔ زیر بدست میآوریم :

$$\Delta v = \mu^{-1} \Delta \Phi$$

که مقادیر μ_{ij} با عبارت زیر داده میشوند :

$$\mu_{ij} = \frac{\partial \Phi_i}{\partial v_j} \qquad \begin{matrix} i = 1 , \cdots , n \\ j = 1 , \cdots , n \end{matrix}$$

تقارب فقط درصورتی حاصل خواهد شد که از جملات درجهٔ اول ببالا درمعادلهٔ (۲۰) بتوان صرفنظر نمود و ما بعداً نشان خواهیم داد که با قائل شدن محدودیت درتغییرات Δv میتوان مسئله را بجواب رسانید.

با استفاده از روابط (۱۹) و (۲۱) ، معادلهٔ (۲۲) را بدست می‌آوریم :

$$\Delta x_i \approx -C_i^{-1}\left(\sum_{k=1}^{p} \Delta L_k \frac{\partial C_k}{\partial L_i} x_i + \sum_{k=1}^{q} \Delta V_k \frac{\partial C_k}{\partial V_i} x_i + \sum_{k=1}^{n} \Delta T_k \frac{\partial C_k}{\partial T_i} x_i\right) \qquad (۲۲)$$

معادلهٔ (۲۲) را بشکل زیر مرتب می‌نمائیم :

$$D_{i,1} \Delta l + D_{i,2} \Delta v + D_{i,3} \Delta t + C_i \Delta x_i = o' \qquad (۲۳)$$

$D_{i,1}$ ، $D_{i,2}$ و $D_{i,3}$ عبارت از $n \times p$ ، $n \times q$ و $n \times n$ ماتریس هستند که ستونهای هریک بترتیب از $\frac{\partial C_k}{\partial L_k} x_i$ ، $\frac{\partial C_k}{\partial V_k} x_i$ و $\frac{\partial C_k}{\partial T_k} x_i$ تشکیل یافته است .

تعداد این ماتریسها m دستگاه است که هریک مربوط به یک سازنده می‌باشد .

محاسبهٔ مشابهی درمورد بیلان حرارت به معادلهٔ (۲۴) منجر میگردد :

$$\Delta \beta \approx \sum_{k=1}^{p} \Delta L_k \frac{\partial \beta}{\partial L_k} + \sum_{k=1}^{q} \Delta V_k \frac{\partial \beta}{\partial V_k} + \sum_{k=1}^{n} \Delta T_k \frac{\partial \beta}{\partial T_k} + \Delta Q \qquad (۲۴)$$

با توجه باینکه برای حصول به‌جواب صحیح رابطهٔ $\Delta\beta=-\beta_0$ باید برقرار باشد ، خواهیم داشت :

$$E_1\Delta l+E_2\Delta v+E_3\Delta t+\Delta Q=-\beta_0$$

که E_1 ، E_2 و E_3 ماتریسهای مشتقات جزئی می‌باشند .

علاوه برمعادلات فوق که برای تخمین تصحیحات لازم بکار میروند باید ازمعادلات مشخصه نیز استفاده نمود . مسلمست که درموردمتغیرهائی که ازابتدا مقادیرحقیقی‌آنهارا بکاربرده‌ایم بایدضریب تصحیح صفر را مصرف کرد .

بنابراین معادلات مشخصه صورت زیر را پیدا می‌نمایند :

$$\Delta\zeta=0 \quad \text{یا} \quad \Delta\zeta_1+R\Delta\zeta_2=0 \quad \text{یا} \quad \Delta x_{i,j}=S$$

تمام معادلات مربوطه را میتوان بشکل ماتریسی نشان داد :

$$\begin{array}{c} \\ n \\ n \\ n \\ n \\ n \\ n \\ p+q-n \end{array}
\left[\begin{array}{ccccccc}
p & q & n & n & n & n & n \\
A_1 & A_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\
E_1 & E_2 & E_3 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
D_{1,1} & D_{1,2} & D_{1,3} & 0 & C_1 & 0 & 0 \\
D_{i,1} & D_{i,2} & D_{i,3} & 0 & 0 & C_i & 0 \\
D_{m,1} & D_{m,2} & D_{m,3} & 0 & 0 & 0 & C_m \\
\multicolumn{7}{c}{\text{معادلات مشخصه}}
\end{array}\right]
\left[\begin{array}{c} \Delta l \\ \Delta v \\ \Delta t \\ \Delta q \\ \Delta x_1 \\ \Delta x_i \\ \Delta x_m \end{array}\right]
=
\left[\begin{array}{c} 0 \\ \alpha_0 \\ -\beta_0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{array}\right] \qquad (۲۶)$$

ازنظر اصول کلی ، معادله (۲۶) پس از چندبار تکرار باید جواب مطلوب را بدست دهد . ولی گاهی اوقات این تکرار (حدس و خطا) ممکنست حالت نوسانی پیدا نماید و یا اصولاً ناپایدار گردد . نظربراینکه فقط تفاوتهای درجهٔ اول درمشخص کردن تصحیحات لازم درنظر گرفته میشوند ، بنابراین دریک راه حل پایدار که به جواب منجر شود ، باید بتوان از جملات درجات بالاتر درمقابل عبارات درجهٔ اول چشم پوشید . برای روشن شدن مطلب اثر تغییرات در دبی و دما را برروی انتالپی ، θ ، جریان مایع واحد j ام درنظر می گیریم :

$$\Delta\theta=\Delta(l_jh_j)=h_j\Delta l_j+l_j\Delta T_j\,\frac{\partial h_j}{\partial T_j}+\frac{1}{2}\left(\Delta T_j\,\Delta l_j\,\frac{\partial h_j}{\partial T_j}+l_j\Delta T_j^2\,\frac{\partial^2 h}{\partial T_j^2}\right)\qquad(۲۷)$$

درتکرار مرتبه r ام ، مقدار $\Delta\theta_r$ مساوی عبارت زیر خواهد شد :

$$\Delta\theta_r=h_j\,\Delta l_j+l_j\Delta T_j\,\frac{\partial h_j}{\partial T_j}$$

و خطائی که در تکرار مرتبهٔ بعد داخل خواهد گردید عبارتست از :

$$\Delta\theta\approx\frac{1}{2}\left(\Delta T_j\,\Delta l_j\,\frac{\partial h_j}{\partial T_j}+l_j\,\Delta T^2\,\frac{\partial^2 h_j}{\partial T_j^2}\right)$$

β درصورتی بسمت صفر میرود که برای تمام جریانها رابطهٔ $\Delta\theta_r>\Delta\theta_{r+1}$ برقرار باشد .

$$h_j\Delta l_j+l_j\Delta T_j\,\frac{\partial h_j}{\partial T_j}>\frac{1}{2}\left(\Delta l_j\,\Delta T_j\,\frac{\partial h_j}{\partial T_j}+l_j\Delta T_j^2\,\frac{\partial^2 h_j}{\partial T_j^2}\right)$$

یا :

$$\frac{\Delta l_j}{l_j}+\frac{\Delta T_j}{h_j}\,\frac{\partial h_j}{\partial T_j}>\frac{1}{2}\left(\frac{\Delta l_j}{l_j}\,\frac{\Delta T_j}{h_j}\,\frac{\partial h_j}{\partial T_j}+\frac{\Delta T_j^2}{h_j}\,\frac{\partial^2 h_j}{\partial T_j^2}\right)\qquad(۲۸)$$

محاسبه درمورد جریانهای بخار نیز مطابق روش فوق انجام می گیرد .

شرط لازم برای داشتن دقت قبول درمحاسبهٔ بیلان سازندگان کمی پیچیده‌تر است . برای محاسبهٔ تغییرات متغیرها ، باید معادلهٔ (۲۳) را که تغییرات l و v و t را نسبت به x_i بدست میدهد ، بصورت یکسری معادلات خطی بین x_i و Δx_i نوشت :

$$\Delta x_i=-C_i^{-1}R_ix_i\qquad(۲۹)$$

که در رابطهٔ فوق :

$$R_i = \sum_{k=1}^{p} \Delta l_k \frac{\partial C_i}{\partial L_k} + \sum_{k=1}^{q} \Delta V_k \frac{\partial C_i}{\partial V_k} + \sum_{k=1}^{n} \Delta T_k \frac{\partial C_i}{\partial T_k} \tag{۳۰}$$

باین ترتیب R_i تغییرات حاصل در C_i را با یک تقریب درجهٔ اول بدست میدهد .

بنابراین :

$$\Delta C_i \approx R_i$$

$$\Delta x_i \approx -C_i^{-1} \Delta C_i x_i \approx -S_i x_i \tag{۳۱}$$

درتکرار مرتبهٔ r ام خطای موجود درمجموع بیلانهای مواد ، a_r با عبارت زیر داده میشود :

$$a_r = u - \sum_{i=1}^{m} (x_i)_r \tag{۱۰}$$

با استفاده از معادلهٔ (۲۶) :

$$a_r = \sum_{i=1}^{m} \Delta x_i$$

از رابطه (۳۱) معادلهٔ (۳۲) را بدست می‌آوریم :

$$u - \sum_{i=1}^{m} (1-S_i)\,(x_i)_r \approx 0 \tag{۳۲}$$

و :

$$a_r \approx -\sum_{i=1}^{m} S_i (x_i)_r \tag{۳۳}$$

درتکرار بعدی :

$$(x_i)_{r+1} = -(C_i + \Delta C_i)^{-1} f_i = -(1 + C_i^{-1} \Delta C_i)^{-1} C_i^{-1} f_i$$

f بردار مربوط به شدت جریان خوراك اصلی دستگاه است .

با بسط معادلهٔ فوق و جانشین ساختن رابطهٔ (۷) خواهیم داشت :

$$(x_i)_r = -C_i^{-1} f_i$$

برطبق تعریف S_i :

$$(x_i)_{r+1}=(1-S_i+S_i^2-S_i^3\cdots)(x_i)_r$$

و بنابراین :

$$\alpha_{r+1}=u-\sum_{i=1}^{m}(x_i)_{r+1}$$

$$=u-\sum_{i=1}^{m}(1-S_i+S_i^2-S_i^3\cdots)(x_i)_r$$

$$=u-\sum_{i=1}^{m}(1-S_i)(x_i)_r-\sum_{i=1}^{m}(S_i^2-S_i^3\cdots)(x_i)_r \quad (۳۴)$$

با ترکیب معادلات (۳۲) و (۳۴) :

$$\alpha_{r+1}\approx-\sum_{i=1}^{m}(S_i^2-S_i^3+\cdots)(x_i)_r \quad (۳۵)$$

باین ترتیب ملاحظه میشود که α وقتی بسمت صفر میرود که :

$$\sum_{i=1}^{m}S_i(x_i)_r>\sum_{i=1}^{m}(S_i^2-S_i^3+\cdots)(x_i)_r \quad (۳۶)$$

رابطهٔ فوق وقتی برقرار است که برای هرسازنده داشته باشیم :

$$|S_i|>|S_i|^2-|S_i|^3+\cdots \quad (۳۷)$$

یعنی ضریب کمیت‌های مشخصه S_i (eigen values) یا $C_i^{-1}\triangle C_i$ باید کوچکتر از $\frac{۱}{۲}$ باشد . یا بایک تقریب قابل قبول میتوان گفت که خطای نسبی هریک از اجزاء C_i باید کوچکتر از ۰٫۵ باشد . یعنی :

$$\frac{\triangle C_{j,k}}{C_{j,k}}<0.5 \quad (۳۸)$$

باین ترتیب‌دیده میشود که بارعایت محدودیت‌های لازم درهرجزء ازسیستم، شرایط موردنظر برقرارخواهند شد. چون حداکثر تغییرات نسبی مجاز برابر ۰٫۵ است برای آنکه برنامهٔ محاسبات بین‌حالت نوسانی ویک تقارب کند واقع شود ، باید خطای نسبی را کوچکتر از ۰٫۴ درنظر بگیریم .

باین ترتیب خواهیم داشت :

$$\frac{\Delta l_k}{L_k} < 0.4 \qquad k=1,2,\cdots p \qquad (۳۹)$$

$$\frac{\Delta V_k}{V_k} < 0.4 \qquad k=1,2,\cdots,q \qquad (۴۰)$$

$$\frac{K_{ij}(T_j+\Delta T_j)-K_{i,j}(T_j)}{K_{i,j}(T_j)} < 0.4 \qquad j=1,2,\cdots,n \qquad (۴۱)$$

که با معادلات (۲۸) و (۳۶) توافق دارند.

برای تحصیل یک تقارب سریع، قبل از هر تکرار محاسبه لازمست تا خطاهای نسبی موجود را مورد دقت قرار داده و بزرگترین مقدار آنها را که به r نشان میدهیم درنظر گرفت. اگر $r<0.4$ باشد، مقصود حاصل است ولی اگر $r>0.4$ باشد کلیه خطاهای نسبی محاسبه شده را باید با عبارت $0.4/r$ ساده نمود.

دقت درمحاسبات

بردار α مبین عدم توافق بین مجموع بیلانهای جرمی سازندگان و بیلان کلی مواد سیستم است. ما کمیتی مثل ε_m را که تابعی از α با عبارت ذیل است، بعنوان معیاری از دقت محاسبه درنظر می گیریم:

$$\varepsilon_m=\sqrt{\left(\frac{\alpha_1^2+\alpha_2^2+\cdots+\alpha_j+\cdots+\alpha_n^2}{n}\right)}$$

درمورد بیلان حرارت نیز میتوان چنین کمیتی را برای بردار β اختیار نمود. ولی رابطهٔ حاصل بستگی به‌آحاد مصرف شده برای انتالپی و شدت جریان جرمی خواهد داشت و لذا برای بدست آوردن یک معادلهٔ بدون بعد عاملی مانند Γ_j را بنحوی درنظر می گیریم که درمورد هرواحد با عبارت زیر بیان میشود:

$$\Gamma_i=\frac{(\text{شدت حرارت خروجی})-(\text{شدت حرارت ورودی})}{(\text{شدت حرارت خروجی})+(\text{شدت حرارت ورودی})}$$

همچنین معیار دقت دیگری نیز مثل ε_H را با عبارت ذیل فرض می کنیم:

$$\varepsilon_H=\sqrt{\left(\frac{\Gamma_i^2+\cdots+\Gamma_j^2+\cdots+\Gamma_n^2}{n}\right)}$$

باین ترتیب محاسبات آنقدر تکرارخواهد شد تا $\varepsilon_M<\overline{\varepsilon_M}$ و $\varepsilon_H<\overline{\varepsilon_H}$ گردد که $\overline{\varepsilon_M}$ و $\overline{\varepsilon_H}$ خطاهای قابل قبول میباشند.

کاربرد روش حل عمومی مذکور دراین مقاله را میتوان باشکال مختلف توسعه داد تا درحل مسائل دیگری که درآنها فرض واحدهای تعادلی صحیح بنظر نمیرسد مورداستفاده قرارگیرد. مثلاً موضوع

راندمان سینی‌های برج را ممکنست بطور مستقیم بصورت روابط Murphree و یا غیرمستقیم با درنظر گرفتن عوامل اختلاط معکوس (Back mixing) درمعادلات اصلی وارد نمود .

شرایط غیرتعادلی با فرض وجود یک کندانسور کلی (Total condenser) ایجاد میشود. اعداد و اطلاعات مربوط بحالت تعادل ممکنست بصورت فراریت‌های نسبی (Relative volatilities) و یا بشکل تابعی از دما و ترکیب سازندگان دراختیار باشد . در زیر به بحث دربارهٔ چگونگی حل این قبیل مسائل می‌پردازیم .

واحدهای غیرتعادلی: اگر واحدهای دستگاه را غیرتعادلی فرض نمائیم ، روش فرموله کردن مسئله با حالت قبل اندکی متفاوت خواهد بود . واحدهای غیرتعادلی ممکنست دراثر استفاده از یک کندانسور کلی و یا بعلت مخلوط و یا جدا کردن جریانهای مواد بنحوی که فقط یک فاز ایجاد شود، حاصل گردند . وجود چنین واحدهائی باعث افزایش یک درجهٔ آزادی درسیستم خواهد شد .

یک واحد غیرتعادلی مثلاً واحد n ام را که فرض میکنیم یک کندانسور کلی باشد ، درنظر می‌گیریم . دراین‌حالت، درجریانهای خروجی ازاین واحد فاز بخار وجود نداشته و ترکیب فاز مایع حاصل برابر ترکیب بخار ورودی به‌آن است . یعنی :

$$x_{i,n} = y_{i,n-1}$$

$$\sum x_{i,n} = \sum y_{i,n-1} = 1$$

بنابراین درحل چنین مسائلی لازمست تا بجای $\sum x_{i,n}$ مقدار آن یعنی واحد را قرار داد و درنتیجه معادلهٔ مربوط به $\sum x_{i,n}$ حذف شده و بجای آن از یک معادلهٔ مشخصه باید استفاده نمود . این معادلهٔ مشخصه میتواند مثلاً شدت خروج حرارت ازکندانسور یا دمای جریان برگشتی T_n (Ref lux) را بیان نماید .

تعادل وابسته به ترکیب مواد

اگر حالت تعادل بنحوی باشد که دراثر تغییر غلظت سازندگان مختل گردد ، روش حل مسئله باحالات قبل تفاوت اساسی پیدا خواهد کرد .

درتحت چنین شرایطی‌دیگر نمیتوان غلظت‌هریک ازسازندگان را درهرواحد ، $x_{i,1}$ ، تنها بشکل تابعی ازفازهای مایع، بخار و دما بیان نمود، بلکه لازمست که علاوه بر بردارهای t و v و l ، بردارجدید دیگری نیز مثل x_i را برای هرسازنده با شرط زیر درنظر گرفت :

$$\sum_{i-1}^{m} x_i = u$$

برای‌هرسازندهٔ ، i ، عامل γ_i راکه عبارت‌ازخطای‌موجود درمعادلهٔ(۶)باشد با استفاده ازرابطهٔ زیر محاسبه میکنیم :

$$\gamma_i = C_i x_i + f_i \qquad (۴۲)$$

مقادیر مفروض برای متغیرها درهرتکرار محاسبات باید تصحیح شوند تا سرانجام شرایط مربوط به بردارهای α و β و روابط زیر برقرارگردند :

$$\Delta\gamma_i = -\gamma_{i_0}$$
$$(۴۳)$$
$$\sum \Delta x_i = 0$$

مشتقات جزئی دراین‌حالت عبارتند از :

$$\frac{\partial\gamma_i}{\partial\zeta} = \frac{\partial C_i}{\partial\zeta}\,\partial x_i \qquad (۴۴)$$

که در رابطهٔ فوق $\zeta = l, v, t$ و $x_k \neq i$ و وقتی $\zeta = x_i$ باشد :

$$\frac{\partial\gamma_i}{\partial\zeta} = \frac{\partial C_i}{\partial\zeta} x_i + C_i \frac{\partial x_i}{\partial\zeta} \qquad (۴۵)$$

اگر انتالپی‌ها نیز بصورت توابعی از ترکیبات سازندگان داده شوند ، مشتقات جزئی آنها را در $\Delta\beta$ باید وارد نمود .

از ترکیب روابط قبل ، معادلهٔ (۴۶) حاصل میگردد :

(۴۶)

$$\begin{bmatrix} A_1 & A_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ E_1 & E_2 & E_3 & 1 & H_{1,1} & H_{1,i} & H_{1,m} \\ D_{1,1} & D_{1,2} & D_{1,3} & 0 & G_{1,1} & G_{1,i} & G_{1,m} \\ D_{i,1} & D_{i,2} & D_{i,3} & 0 & G_{i,1} & G_{i,i} & G_{i,m} \\ D_{m,1} & D_{m,2} & D_{m,3} & 0 & G_{m,1} & G_{m,i} & G_{m,m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta l \\ \Delta v \\ \Delta t \\ \Delta q \\ \Delta x_1 \\ \Delta x_i \\ \Delta x_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \alpha_0 \\ -\beta_0 \\ -\gamma_{10} \\ -\gamma_{i0} \\ -\gamma_{m0} \end{bmatrix}$$

معادلات مشخصه

رابطهٔ (۴۶) جنبهٔ کاملاً عمومی داشته و درصورتیکه مقادیر K و انتالپی‌ها مستقل از ترکیب سازندگان باشند بمعادلهٔ (۲۶) ساده میگردد .

ساختمان برنامهٔ کامپیوتری

ابتداء به بحث دربارهٔ اجزاء برنامهٔ کامپیوتری که بتوان ازآن درحل مسائلی که مختصات آنها با دستگاه معادلهٔ (۲۶) داده میشود استفاده کرد می‌پردازیم . درطرح این برنامه باید رابطهٔ بین گنجایش حافظه و سرعت ماشین درمحاسبات را درنظر گرفت .

مثلاً ممکنست معادلهٔ ماتریسی(۲۶) را بهمان شکل به‌حافظهٔ کامپیوتر سپرد ولی با این کار مقدار زیادی ازظرفیت ماشین بوسیله صفرها اشغال خواهد شد . استفاده از روشهای معمول درتبدیل ماتریسها نیز غالباً نمیتواند فضاهای خالی آنها را باندازهٔ لازم کوچک نماید .

ولی چون فرض کردیم که انتالپی‌های ملکولی و حالت تعادل تنها به دما بستگی دارند میتوان بردارهای $\Delta x_1 \cdots \Delta x_i \cdots \Delta x_m$ را حذف نمود و درنتیجه معادلهٔ (۲۶) بمعادلهٔ ماتریسی زیر خلاصه میشود :

$$\begin{bmatrix} A_1 & A_2 & 0 & 0 \\ D_1 & D_2 & D_3 & 0 \\ E_1 & E_2 & E_3 & 1 \\ & & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta l \\ \Delta v \\ \Delta t \\ \Delta q \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \alpha_0 \\ -\beta_0 \\ \end{bmatrix} \qquad (۴۷)$$

در رابطهٔ اخیر A و E همان معانی قبلی خود را دارند و :

$$D_n = -\sum_{i=1}^{m} C_i^{-1} D_{i,n} \qquad n=1\,,2\,,3 \qquad (۴۸)$$

از رابطهٔ (۱۷) ، n معادله حاصل میشود که درتمام طول حل مسئله ثابت خواهند ماند و درنتیجه میتوان ازآنها درحذف n جزء از Δl و Δv استفاده نمود . این کار از بار حافظهٔ کامپیوتر میکاهد و تنها لازمست تا $p+q-n$ جزء مورد عمل واقع شوند .

برای انجام این امر Δl و Δv را بشکل زیر درنظر می‌گیریم :

$$\begin{array}{r} n \\ p+q-n \end{array}\begin{bmatrix} \Delta Z_1 \\ \cdots\cdots \\ \Delta Z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Delta l \\ \cdots\cdots \\ \Delta v \end{bmatrix}\begin{array}{l} p \\ \\ q \end{array}$$

بنابراین معادلهٔ (۱۷) را بصورت زیر میتوان نوشت :

$$A_3 \Delta Z_1 + A_4 \Delta Z_2 = 0$$

$$\Delta Z_1 = - A_5 \Delta Z_2 \qquad (٤٩)$$

دراین رابطه $A_5 = A_3^{-1} A_4$ میباشد که باید درابتدای حل هرمسئله محاسبه شده و بحافظه کامپیوتر سپرده شود تا درمواقع ضروری برای محاسبهٔ ΔZ_1 از روی ΔZ_2 مورداستفاده قرارگیرد .

بعنوان مثال درمعادلهٔ (۲۳) ، در دوجملهٔ اول ، مقادیر Δl و Δv موجود هستند که میتوان آنها را بشکل زیر بیان نمود :

$$D_{i,1} \Delta l + D_{i,2} \Delta v \equiv D_{i,4} \Delta Z_1 + D_{i,5} \Delta Z_2$$

عبارت فوق برطبق معادلهٔ (۴۹) معادل $D_{i,6} \Delta Z_2$ میباشد که :

$$D_{i,6} = D_{i,5} - D_{i,4} A_5$$

وقتی روابط بالا بترتیب مذکور ساده گردید ، معادلاتی که اثر تغییر مقادیر متغیرها را درخطای حاصل از بیلان مواد نشان میدهد با عبارت (۵۰) داده خواهد شد :

$$\left[W_6 \;\vdots\; W_7 \right] \begin{bmatrix} \Delta Z_2 \\ \hdashline \Delta t \end{bmatrix} = \alpha_0 \qquad (۵۰)$$

که در رابطهٔ فوق :

$$W_6 = - \sum_{i=1}^{m} C_i^{-1} D_{i,6}$$

$$W_7 = - \sum_{i=1}^{m} C_i D_{i,3}$$

بیلان حرارت و معادلات مشخصه را میتوان یکجا بشکل زیر درنظرگرفت :

$$\left[\begin{array}{c:c:c} E_1 & 1 & E_3 \\ \hdashline W_1 & W_2 & W_3 \end{array} \right] \begin{bmatrix} \Delta Z_2 \\ \hdashline \Delta q \\ \hdashline \Delta t \end{bmatrix} = \begin{array}{l} \begin{bmatrix} -\beta_0 \\ \hdashline \theta \end{bmatrix} \end{array} \begin{array}{l} \text{بیلان حرارت} \\ \text{معادلات مشخصه} \end{array}$$

که پس از حذف Δq :

$$\left[W_4 \;\vdots\; W_5 \right] \begin{bmatrix} \Delta Z_2 \\ \hdashline \Delta t \end{bmatrix} = \left[\Phi \right] \qquad (۵۱)$$

$$W_4 = W_1 - W_2 E_1$$

$$W_5=W_3-W_2E_3$$

$$\Phi=\theta+W_2\beta_0$$

W_2 مشخصات حرارت مورد لزوم واحدها را بدست میدهد. پس از ساده‌ترکردن روابط ، هرویژگی‌خاص با تعویض سطر مربوطه درمعادلات مشخصه سیستم با سطر مربوط به بیلان حرارت حاصل میشود .

امتیاز این روش درآنستکه نیاز به ساده کردن معادلهٔ (۵۱) با طریقه متداول را برطرف می‌نماید ، زیرا درصورت لزوم این عمل را با انتقال سطور نظیر معادلهٔ (۲۶) میتوان حاصل کرد .

از ترکیب معادلات (۵۰) و (۵۱) خواهیم داشت :

$$\begin{bmatrix} W_6 & W_7 \\ W_4 & W_5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta Z_2 \\ \Delta t \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \theta \end{bmatrix} \qquad (۵۲)$$

با استفاده از رابطهٔ (۵۲) مقادیر ΔZ_2 و Δt و درنتیجه Δl و Δv را میتوان محاسبه نمود .

طرح برنامه

نخستین قدم درطرح برنامهٔ محاسبه مشخص نمودن اجزاء سیستم مورد مطالعه است . برای‌این‌امر بهرجریان سیستم دواندیس وابسته می‌نمائیم که اندیس اول مربوط به مبدأ و دومی نمودار انتهای جریان می‌باشد .

واحد اول را (که درمورد ستونهای جدا کننده معمولاً جوش‌آور است) با شمارهٔ ۱ و محیط خارج را با شمارهٔ صفر مشخص می‌نمائیم . برای تشکیل معادلات مشخصه فرض میکنیم که متغیرهای موردنظر در ابتداء مقادیر حقیقی‌خود را داشته باشند بطوریکه مثلاً درمورد برج جدا کنندهٔ شکل ۱ ، شرط $V_{3,0}=a$ (a یک مقدار معلومست) ΔV_{10} را مساوی‌صفر نماید. غلظت سازندگان‌را نیز بوسیلهٔ سه‌اندیس مشخص می‌نمائیم که اندیس اول نوع سازنده را نشان میدهد .

با این شرایط و با در دست داشتن مقادیر انتالپی و مشخصات حالت تعادل برنامهٔ محاسبات را بترتیب زیر میتوان تنظیم کرد :

۱ . a : مقادیری برای t و l و v درنظر بگیرید بطوریکه دربیلان کلی مواد صدق نمایند . (برای حدس اول ممکنست فرض کرد که جریان مولی سرریز برج ثابت بوده و دمای هرسینی برابر دمای خوراك موجود درآن می‌باشد) .

b :

$$\alpha_0=u$$

$$W_n=0 \qquad n=4\,,5\,,6\,,7$$

$$\Phi=0$$

قرار دهید .

c : A_5 را محاسبه کنید .

۲ . a : C_i را تشکیل داده و C_i^{-1} را حساب کنید .

b : x_i را محاسبه نمائید .

c : $\alpha_0 \leftarrow \alpha_0 - x_i$

d : $D_{i,6}$ و $D_{i,3}$ را تشکیل داده ومقادیر $C_i^{-1}D_{i,6}$ و $C_i^{-1}D_{i,3}$ را حساب کنید .

e : معادلات‌مشخصه‌رادرنظر گرفته ودرصورت‌لزوم‌روابط مربوط به $x_{i,n}$ را درآنهاقراردهید .

f : $W_6 \leftarrow W_6 - C_i^{-1}D_{i,6}$

$W_7 \leftarrow W_7 - C_i^{-1}D_{i,3}$

g : قسمت ۲ را برای هرسازنده تکرار کنید .

۳ . a : ε_H ، ε_M وسایر خطاها را حساب کنید . اگر درحد قابل قبول باشند قسمت ۶ را اجراء نمائید .

۴ . a : بیلانهای حرارت را تشکیل دهید .

b : معادلات مشخصه را تکمیل کنید .

c : اگر واحدهای غیرتعادلی نیز وجود دارند W_6 و W_7 و α_0 را با آنها تطبیق دهید .

۵ . a : معادلهٔ (۵۱) را حل نموده و مقادیر ΔZ_2 و Δt را بدست آورید .

b : ΔZ_1 را محاسبه نمائید $(\Delta Z_1 = -A_5 \Delta Z_2)$

c : r ، بزرگترین جزء $\ldots \quad , \frac{\Delta V_1}{V_1} , \ldots , \frac{\Delta L_2}{L_2} , \frac{\Delta L_1}{L_1}$ ، را مشخص کنید .

d : اگر $r \leqslant 0.4$ به قسمت f پیش بروید .

e : $\Delta L_1 = 0.4 \frac{\Delta L_1}{r} \cdots$

f : $l \leftarrow l + \Delta l$

$v \leftarrow v + \Delta v$

$t \leftarrow t + \Delta t$

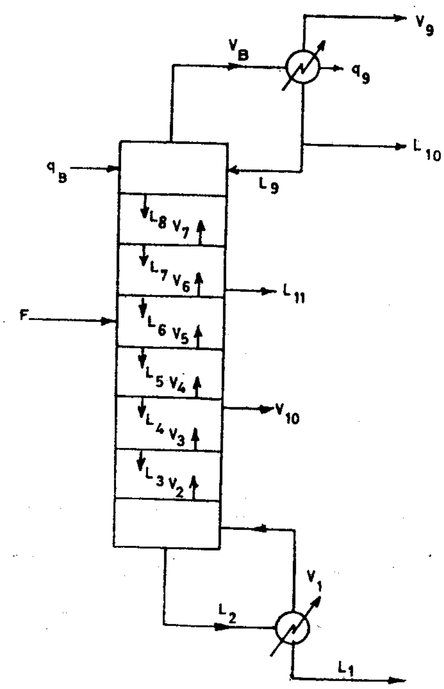
g : قسمت ۲ ببعد را تکرار نمائید .

۶ . ثبت نتایج حاصل

برنامهٔ مذکور درفوق را با تغییراتی دراجزاء آن میتوان درحل مسائلی که از شرایط تعادل دور بوده ویا حالت تعادل وابسته دارند نیز بکار برد . البته مسلمست که دراینحالت نمی‌توان x_i ها را حذف

نموده و مسئله را مانند حالت قبل ساده کرد . همچنین لازمست تا ماتریسهای G را که از مشتقات جزئی بیلانهای مواد نسبت به تغییر ترکیب سازندگان حاصل شده‌اند و نیز ماتریسهای H را هم تشکیل داد . (برای اطلاع بیشتر بمنابع ۷ و ۱۰ و ۱۱ مراجعه شود) .

باید دانستکه همین برنامه را میتوان بعنوان هسته مرکزی دربرنامه‌های بزرگتری که برای محاسبات اپتیمم طرح دستگاه‌ها نوشته میشوند نیز بکار برد .



شکل (۱)

منابع

1. Amundson, N. R., & Pontinen, A. J. Ind. Engng. Chem., ind. (int) Edn, 1958, **50**, 730.

2. Lyster, W. N., Sullivan, S. L., Billingsley, D. S. & Holland, C. D. Petrol. Refiner, 1959, **38**, 221.

3. Pieser, N. Chem. Engng., 1960, **67**, 1129.

4. Rose, A., Sweeney, R. F. & Schrodt, V. N. Chem. Engng., Albany, 1958, **50**, 737.

5. Musk, F. I. & Totman, E. D. J. appl. Chem. Lond., 1960, **10**, 447.

6. Lyster, W. N. & Holland, C. D. Petrol. Refiner, 1959, **38**, 156.

7. Holland, C. P., «Multicomponent Distillation», 1963 (New York: Prentice – Hall Inc.)

8. Hansen, D. N., Duffin, J. H. & Nonervell, X. «Computation of Multistage Separation Processes», 1962, (Reinhold Publishing Corporation).

9. Friday, J. R. & Smith, B.D., A. I. Ch. E. Jl., 1964, **10**, 698.

10. Billingsley, D. S. A. I. Ch. E. Jl., 1966, **12**, 1134.

11. Lapidus, L. «Digital Computation for Chemical Engineers», 1962. (New York: Mc. Graw – Hill Book Co.)