

复杂对流传递工业过程的数字仿真

吴 惕 华

(河北化工学院)

摘 要

本文综述了各类传递过程的仿真问题,并利用中心差分法将回旋窑干燥过程的数学模型变换成数值模型。它可表示为具有分裂边界条件的一对非线性二元三对角阵系统。本文设计的算法可获得较精确的数值解,实现了该过程的数字仿真,从而将 Douglas 算法成功地推广到求解两端边值皆为突变的系统。试验表明本算法适应性强,可用于更为复杂的系统。

一、综 述

对流传递、传导(或扩散)以及两者的混合作用是化工过程中最重要的传热传质方式。此类分布参数系统(DPS)的动态模型可用具有确定边界条件的双曲型、抛物型或混合型的偏微分方程(PDE)来描述。其中,典型一维过程的仿真有以下几种情况:

(1) 错流式热交换器中流体间传热过程的数学模型是

$$\frac{\partial T}{\partial t} + V \frac{\partial T}{\partial l} + C(T - T_s) = 0.$$

初始条件为 $T(l, 0) = T_s$; 边界条件为 $T(0, t) = T(t)$ 。

利用 $\frac{\partial T}{\partial t}$ 的向前差分 and $\frac{\partial T}{\partial l}$ 的向后差分,所获得的有限差分方程为

$$T_{i,n+1} = \left(1 - \frac{V\Delta t}{\Delta l} - C\Delta t\right) T_{i,n} + \frac{V\Delta t}{\Delta l} T_{i-1,n} + C\Delta t T_s.$$

该方程仅包含一个未知量 $T_{i,n+1}$, 故为显式,可单独求解。在逐个算出 $n+1$ 时间水平上空间 l 分布场的全部 T 值后,再转入下一个时间水平的计算。显然,此类过程较易仿真。

(2) 流体的扩散过程可描述为

$$\frac{\partial m}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 m}{\partial l^2}.$$

边界条件为 $m(0, t) = m_i$, $m(L, t) = m_0$; 初始条件为 $m(l, 0) = m_0, l > 0$ 。

如果式中的时间微分算子用中心差分近似,可获得相当精确而有效的差分算式,即

Crank Nicolson 方程:

$$\begin{aligned} m_{i-1,n+1} - 2 \left[1 + \frac{(\Delta l)^2}{\alpha \Delta t} \right] m_{i,n+1} + m_{i+1,n+1} \\ = -m_{i-1,n} + 2 \left[1 - \frac{(\Delta l)^2}{\alpha \Delta t} \right] m_{i,n} - m_{i+1,n}. \end{aligned}$$

式中包含因变量 m 的三个未知量, 故为隐式, 不能单独直接求解. 但若依次列出同一时间水平上全部空间格点的所有差分方程, 并代入边值, 经适当排列, 可组成一个以三对角线矩阵为系数阵的方程组. 联立求解此方程组, 得该时间水平上 m 的全部离散值. Thomas 法, 即追赶法, 是求解三对角阵系统简便而有效的算法. 对于长圆棒非稳态的热传导问题和某些具有扩散效应的流动过程, 都可用这种隐式法仿真.

(3) 吸收塔中气体吸收以及逆流式热交换器的传热等过程皆可用下列耦合线性 PDE 描述:

$$\begin{aligned} -V_1 \frac{\partial \theta}{\partial l} - C_1(\theta - \phi) &= \frac{\partial \theta}{\partial t}, \\ V_2 \frac{\partial \phi}{\partial l} + C_2(\theta - \phi) &= \frac{\partial \phi}{\partial t}. \end{aligned}$$

边界条件为 $\theta(0, t) = \theta(t)$, $\phi(L, t) = \phi(t)$;

初始条件为 $\theta(l, 0) = \theta(l)$, $\phi(l, 0) = \phi(l)$.

利用中心差分法, 得到如下形式方程组:

$$\begin{aligned} a^{(1)}\theta_{i-1,n+1} + b^{(1)}\theta_{i,n+1} + b^{(2)}\phi_{i,n+1} + c^{(2)}\phi_{i+1,n+1} &= d^{(1)}, \\ a^{(3)}\theta_{i-1,n+1} + b^{(3)}\theta_{i,n+1} + b^{(4)}\phi_{i,n+1} + c^{(4)}\phi_{i+1,n+1} &= d^{(2)}. \end{aligned}$$

逆流流动方式所引起的分裂边界条件, 使该差分方程为隐函数. 每一因变量有两个未知值, 故需联立求解. 但是, 处理此类分离边值造成的隐式问题, 不能用简便的 Thomas 算法求解. Herron 和 Von Rosenberg 用 Douglas 提出的算法求解, 很有效^[1], 从而解决了逆流式热交换器的仿真问题.

与上述情况不同, 直接式对流型回旋烘干窑代表了一种更为复杂的对流传递工业过程: (1) 窑内传热传质过程相当复杂, 以致难以获得较精确的动态模型, 大多数仍限于静态模型的研究. (2) 仿真时将遇到求解具有两端突变值分裂边界条件的非线性 PDE 组的困难. 因此, 对该系统的研究, 至今仍是一个困难的课题. 本文所提供的方法, 有效而稳定, 并可进一步推广到其它类型回旋窑及更复杂的传递过程系统中去.

二、模 型

1. 数学模型

文 [2] 提出的代表烘窑内干燥过程机理的数学模型表征为具有确定边界条件的双曲型 PDE 组. 为了便于仿真和研究, 可变换为如下的无量纲形式:

$$-V_a \frac{\partial T_a}{\partial l} - C_1(T_a - T_s) - C_2 T_s^3 M_s (T_a - T_s) = \frac{\partial T_a}{\partial \tau}, \quad (1)$$

$$V_s \frac{\partial T_s}{\partial l} + C_3(T_a - T_s) - C_4 T_s^3 M_s = \frac{\partial T_s}{\partial \tau}, \quad (2)$$

$$-V_a \frac{\partial M_a}{\partial l} + C_5 T_s^3 M_s = \frac{\partial M_a}{\partial \tau}, \quad (3)$$

$$V_s \frac{\partial M_s}{\partial l} - C_6 T_s^3 M_s = \frac{\partial M_s}{\partial \tau}. \quad (4)$$

其中,式(1)、(2)为温度过程;式(3)、(4)为湿度过程. 因变量 T_a, T_s, M_a, M_s 分别为热空气和物料的温度和湿度, V_a 和 V_s 为空气和物流速, $C_1 - C_6$ 为与具体过程的结构和物性参数有关的综合系数. 以空气流动方向为正向.

边界条件:

$$\begin{aligned} T_a(0, \tau) &= T_{ai}, \quad T_s(1, \tau) = T_{si} = 0; \\ M_a(0, \tau) &= M_{ai} = 0, \quad M_s(1, \tau) = M_{si}. \end{aligned}$$

初始条件:

$$\begin{aligned} T_a(l, 0) &= T_a(l), \quad T_s(l, 0) = T_s(l); \\ M_a(l, 0) &= 0, \quad M_s(l, 0) = 0, \quad l < 1. \end{aligned}$$

2. 网状离散化

本系统仿真目的是用 CAD 技术作自适应控制系统设计, 故用离散空间离散时间 (DSDT) 的仿真方法是适宜的, 且具有简单和适应性强的特点, 便于设计时调整模型参数. 试验证实, 用 DSDT 仿真给设计带来了莫大方便.

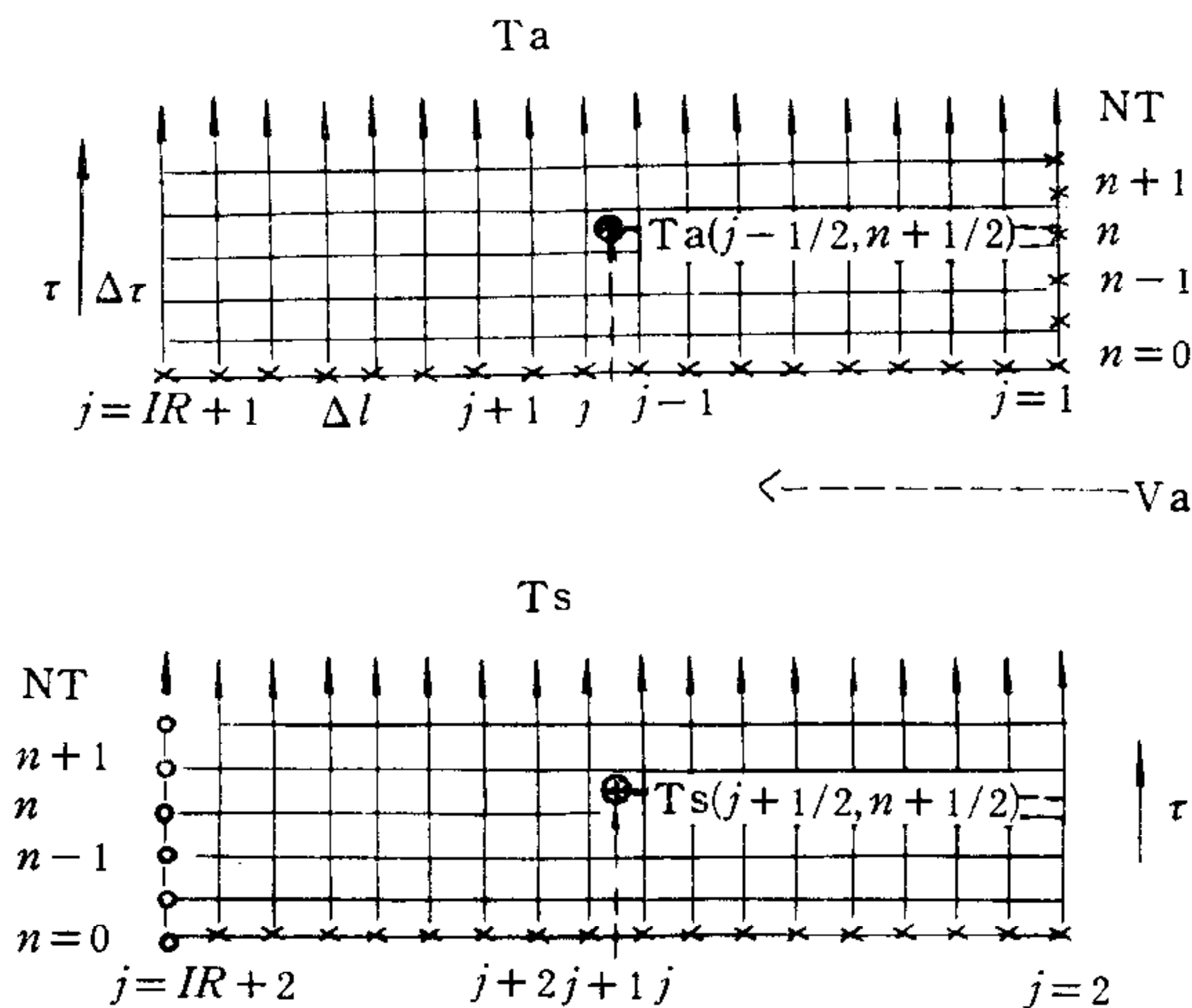


图 1 中心差分法图解

DSDT 仿真用通常的差分近似法, 如图 1 所示. 独立的连续变量 l 和 τ 构成一维无穷条带平面, 并用平面域内有限离散变量来表示, 构成差分网格. 网格间距分别为有限增量 Δl 和 $\Delta \tau$. 为了获得 PDE 的二阶精度逼近, 采用了所谓中心差分法. 此时, 空间和时间的微分算子皆围绕网眼中心的虚构点用相应的差分算子近似. 如

$$\left(\frac{\partial T_a}{\partial l} \right)_{j-\frac{1}{2}, n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left[\frac{T_a(j, n+1) - T_a(j-1, n+1)}{\Delta l} \right]$$

$$\left. + \frac{T_a(j, n) - T_a(j-1, n)}{\Delta l} \right],$$

$$\left(\frac{\partial T_a}{\partial \tau} \right)_{j-\frac{1}{2}, n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left[\frac{T_a(j, n+1) - T_a(j, n)}{\Delta \tau} + \frac{T_a(j-1, n+1) - T_a(j-1, n)}{\Delta \tau} \right].$$

而因变量本身采用平均值近似, 如

$$T_s \left(j + \frac{1}{2}, n + \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{4} [T_s(j+1, n+1) + T_s(j, n+1) + T_s(j+1, n) + T_s(j, n)].$$

3. 数值模型

为了有效地获得数值解, 要按两个不同的空间量 l 增量方向对模型离散化. 温度方程以空气流 V_a , 而湿度方程应以物料流 V_s 为正向. 因此, 先将式 (3)、(4) 中有关项前符号变号, 再用差分式展开. 将差分项和平均项代入式 (1) 到 (4). 并对式 (1)、(2), 设比值项 $\Delta l / \Delta \tau = V_a$; 对式 (3)、(4), 设 $\Delta l / \Delta \tau = V_s$. 经简化、整理, 得代数方程组如下:

$$A_j^{(1)} T_a(j-1, n+1) + B_j^{(1)} T_a(j, n+1) + B_j^{(2)} T_s(j, n+1) + C_j^{(2)} T_s(j+1, n+1) = D_j^{(1)}, \quad (5-1)$$

$$A_j^{(3)} T_a(j-1, n+1) + B_j^{(3)} T_a(j, n+1) + B_j^{(4)} T_s(j, n+1) + C_j^{(4)} T_s(j+1, n+1) = D_j^{(2)}, \quad (5-2)$$

$$a_i^{(1)} M_s(i-1, n+1) + b_i^{(1)} M_s(i, n+1) + b_i^{(2)} M_a(i, n+1) + c_i^{(2)} M_a(i+1, n+1) = d_i^{(1)}, \quad (6-1)$$

$$a_i^{(3)} M_s(i-1, n+1) + b_i^{(3)} M_s(i, n+1) = d_i^{(2)}, \quad (6-2)$$

$$i, j = 2, 3, \dots, IR + 1.$$

其中, 系数

$$A_2^{(1)} = A_2^{(3)} = C_{IR+1}^{(2)} = C_{IR+1}^{(4)} = 0, \quad (5-3)$$

$$a_2^{(1)} = a_2^{(3)} = c_{IR+1}^{(2)} = 0. \quad (6-3)$$

三、算法设计

为了获得数值解, 算法上要解决三个问题: (1) 方程的隐函数性; (2) 两端边值皆突变的分裂边界条件; (3) 非线性.

观察式 (5)、(6) 可见, 代表干燥过程的差分式为隐式, 不能直接求解. 不过, 包含温度和湿度 T_a, T_s, M_a, M_s 的耦合四元 PDE 系统经差分变换后, 分解成分别由温度和湿度变量组成的一对二元子系统. 两子系统间的相关影响隐含在方程式系数中. 因此, 有可能用较简化的算法处理整个系统.

若将式 (5)、(6) 的系数排成矩阵, 则呈现一对二元三对角阵系统形式. 如温度子系统有:

网比呢? 本文用分别取两个流速值作为两个子系统各自的网比来求解的技巧, 获得了相当满意的结果. 这样做的前提是要保证两个不同网比的步数适当匹配, 使温度与湿度变量在时间上同步. 这是关键, 可通过编制程序得以实现. 从而将 Douglas 算法成功地推广到解两端皆为突变的分离边值问题.

由于两个子系统的系数受到相关性的影响, 是温度和湿度变量的函数, 故为非线性系统. 为了处理非线性系数, 采用直接迭代法^[3], 经三次迭代, 数值达到稳定.

四、仿真结果

边界条件为 $M_{si} = 0.05$, $T_{ai} = 1$. 在 IBM 3081 上仿真的步骤和结果如下:

(1) 建立温度的初始条件函数 $T_a(l)$ 和 $T_s(l)$. 在 $M_{si} = 0$ 条件下, 令 $T_{ai} = 1$, 运行程序. 稳定后的结果如图 2 所示. 这代表干物料情况下窑内温度的稳态分布.

(2) 建立干燥过程的初始稳态. 获得 $T_a(l)$ 和 $T_s(l)$ 后, 令 $M_{si} = 0.05$, 继续运行. 从图 3 清楚地观察到窑内温度和湿度受扰动后的动态特性. 大约十分钟后, 除空气湿度还有微小波动外, 整个过程已趋于稳定.

稳态时, 物料的温度分布呈现三个典型带: 预热带、干燥带和加热带. 定性地看, 此结果与 Friedman 的实验曲线^[4]以及文[5]的研究结果相一致. 与稳态时的解析解比较, 误差在 0.5—0.7% 范围以内.

(3) 各种阶跃干扰下的试验结果. 从以上稳态出发, 系统的主要参变量 M_{si} , T_{ai} , V_a 作阶跃变化, 使系统扰动, 皆获得稳定的仿真结果(图略). 由于本系统的 PDE 组求解困难, 故不能与动态仿真结果直接比较. 但是, Herron 等人证明^[6]: 以换热器过程为代表的二元三对角阵系统, 用中心差分法获得的数值解与解析解的误差为 1% 左右. 本干燥系统实际上是以求解二元三对角阵为基础, 故 Herron 的结论可作为评价的参考. 此外, 从图 3(a)—(c) 观察到, 在曲线的间断点附近, 有不大的振荡型畸变, 但该不连续点移动至窑长以外后, 任何畸变随之消失, 如图 3(d) 所示.

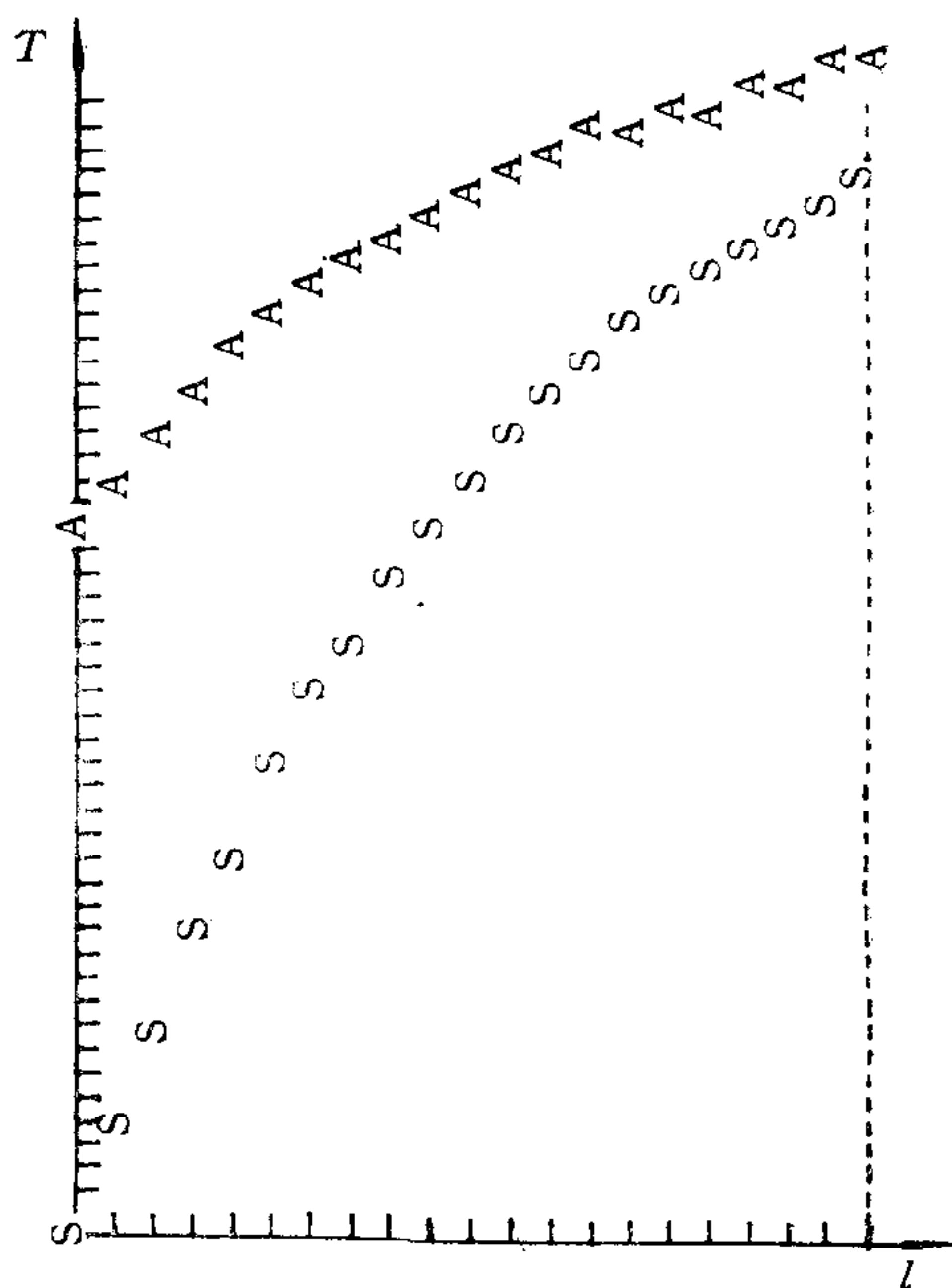


图 2 干物料时稳态温度分布

图注 A— T_a , S— T_s

五、讨论

(1) 如果用顺着流动方向的对角线两点均值代替相邻四格点均值, 如

$$T_s \left(j + \frac{1}{2}, n + \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{2} [T_s(j+1, n+1) + T_s(j, n)],$$

这样不仅进一步简化了差分方程,而且通过试验表明,完全消除了上述在间断点附近的振荡。因为这种均值的实质是把不连续点向前延伸一个步长,故效果较好。

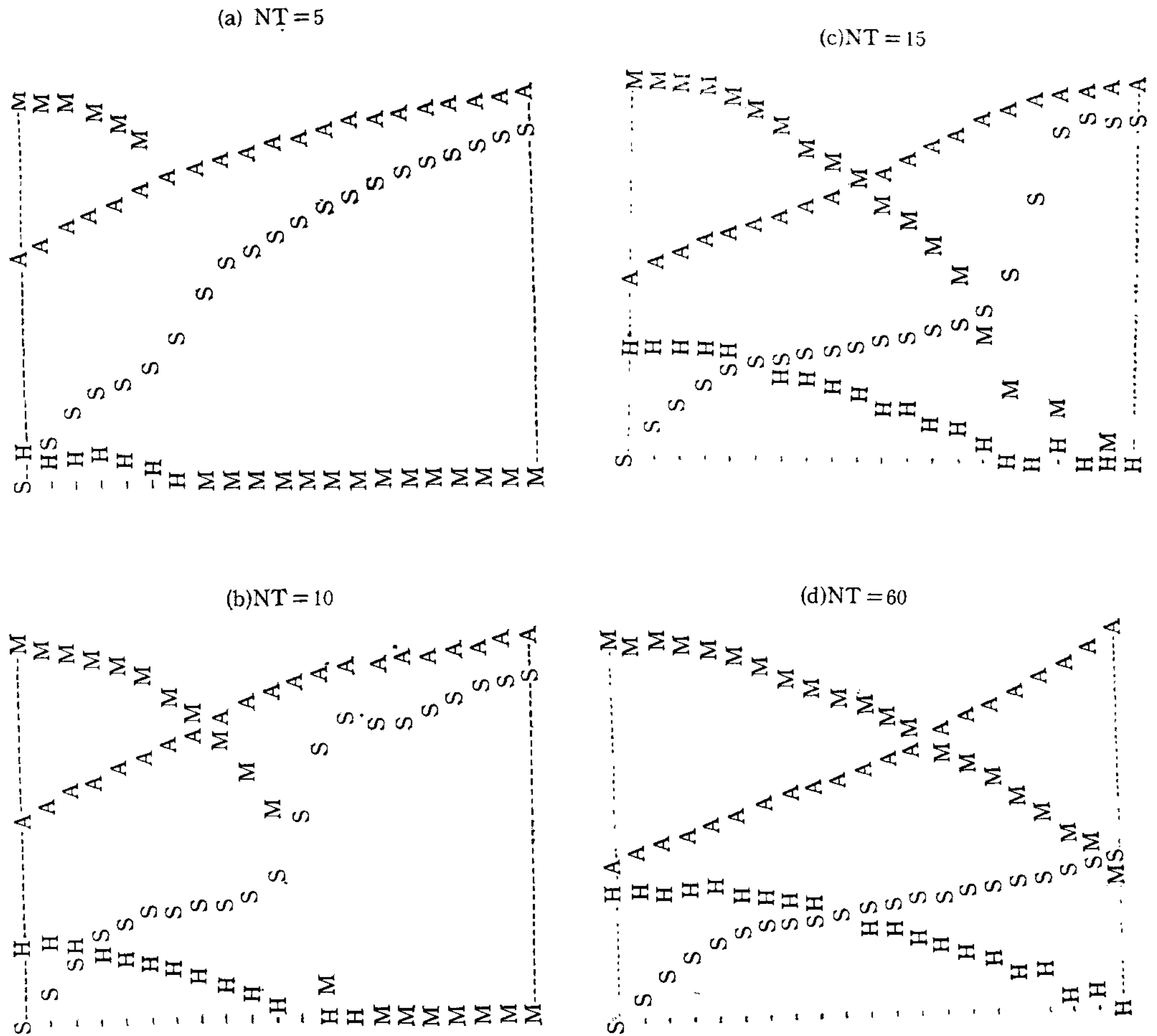


图 3 温度和湿度的动态分布图

图注: M— M_s , H— M_a , S— T_s , A— T_a . NT 是时间步长 0.2174 分的倍数

(2) 可推广到间接式或更复杂的间接、直接混合式回旋窑的仿真。此时,既有对流项又包括热传导项。如果同时用中心差分 and Crank-Nicolson 法差分,可得到两个相关的三元或更多元三对角阵系统。Herron 设计的三元三对角阵算法是 Douglas 算法的扩展^[1],可用来作为求解的基础,进行仿真。

(3) 若重新适当排列中心差分方程的系数,可导出派生形式及相应的算法:

1) 由于系数阵中有一条非主对角线元素为零,故式 (7) 的两个矩阵方程可排列成一个以五对角阵为系数阵的方程组:

- Split Boundary Conditions, *Chemical Engineering Science*, **23**(1968), 345—351.
- [4] Friedman, S. J. et al., Studies in Rotary Drying, *Chemical Engineering Progress*, **45**(1949), 573—588.
- [5] Sharples, K. et al., Computer Simulation of Rotary Driers, *Transaction, Institution of Chemical Engineers*, **42**(1964), T274—T284.
- [6] Herron, E. H. et al., An Efficient Numerical Method for the Solution of Pure Convective Transport Problems with Split Boundary Conditions, *Chemical Engineering Science*, **21**(1966), 337—342.
- [6] Ramirez, W. F., *Process Simulation*, D. C. Heath and Company, (1976).

DIGITAL SIMULATION OF INDUSTRIAL PROCESS FOR COMPLEX CONVECTIVE TRANSPORT

WU TIHUA

(*Hebei Chemical Engineering Institute*)

ABSTRACT

The simulation of various types of transport processes is reviewed. Using the centered difference method, the mathematical model of a rotary drying process is transformed into a numerical model which is expressed by a couple of nonlinear bi-tridiagonal matrix systems with split boundary conditions. As a result of the designed algorithm, the numerical solution is accurately obtained, and the process is simulated on a digital computer. Thus, the Douglas algorithm is successfully extended to the process with boundary values of two discontinuities at both ends. Tests demonstrate that the presented method is flexible and efficient for extension to more complicated systems.