

Рухов А. В.

АППРОКСИМАЦИЯ ПРЕДЕЛЬНОЙ ВЕЛИЧИНЫ АДСОРБЦИИ И РАВНОВЕСНОЙ КОНЦЕНТРАЦИИ В ПОТОКЕ ИНЕРТНОГО НОСИТЕЛЯ АДСОРБТИВА

Работа выполнена под руководством д.т.н., проф. Малыгина Е. Н.

*ТГТУ, Кафедра «Автоматизированное проектирование
технологического оборудования»*

Практически все задачи связанные расчетом и проектированием технологического оборудования относятся к классу задач с частичной определенностью [1]. Так для выполнения расчета взаимосвязанных нестационарных полей концентраций и температур в адсорбционном аппарате колонного типа с неподвижным слоем сорбента по методике [2] кроме физических, физико-химических и кинетических параметров протекания диффузионных и тепловых процессов, возникает необходимость в информации о предельной величине адсорбции как непрерывной функции от парциального давления адсорбтива (концентрации в потоке инертного носителя адсорбтива) и температуры ($A^* = f(C, T)$) и обратной функции равновесной концентрация в потоке от предельной величины адсорбции и температуры ($C^* = f(A, T)$).

Как показывает опыт [3] подобную информацию можно получить из экспериментальных изотерм адсорбции полученных при разных значениях температуры.

Экспериментальные данные носят дискретный характер и прямое их использование в расчете не возможно, либо может привести к значительным погрешностям. По этому возникает необходимость в их дополнительной обработке, приведение к непрерывному виду, т.е. аппроксимации.

Из опыта автора известно, что на сегодняшний день не существует доступных алгоритмов аппроксимации функции двух переменных обладающих следующими качествами:

- универсальность;
- высокая скорость счета;
- надежность.

Исходя из этого, на языке программирования Pascal был разработан алгоритм, в основу которого был положен широко известный метод – метод наименьших квадратов [4], отвечающий требованиям представленным выше.

При выборе аппроксимирующей функции во внимание принимались следующие:

- вид функции должен отражать природу процесса;
- при использовании данного вида функции сумма среднеквадратичных отклонений должна быть минимальной;
- аппроксимирующая функция должна иметь минимальное количество коэффициентов;
- по возможности аппроксимирующая функция должна иметь аналитический переход к обратной функции (равновесная концентрация в потоке как функция от предельной величины адсорбции и температуры).

На основании данных критериев был найден вид функции:

$$A^* = k_0 + k_1 \ln(C) + k_2 T + k_3 T^2 + k_4 T^3 \quad (1)$$

и обратная функция

$$C^* = \exp \left[\frac{A - k_0 - k_2 T - k_3 T^2 - k_4 T^3}{k_1} \right] \quad (2)$$

Результаты аппроксимации приведены в таблице 1 и на рис.1 и рис.2.

Таблица 1

k_0	k_1	k_2	k_3	k_4
0.393	$3.51 \cdot 10^{-2}$	$1.1176 \cdot 10^{-4}$	$3.2 \cdot 10^{-7}$	$7.31 \cdot 10^{-11}$

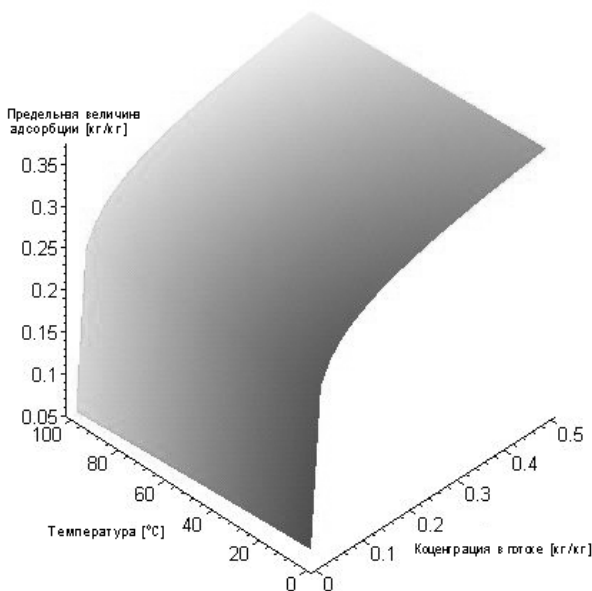


Рис. 1. Предельная величина адсорбции

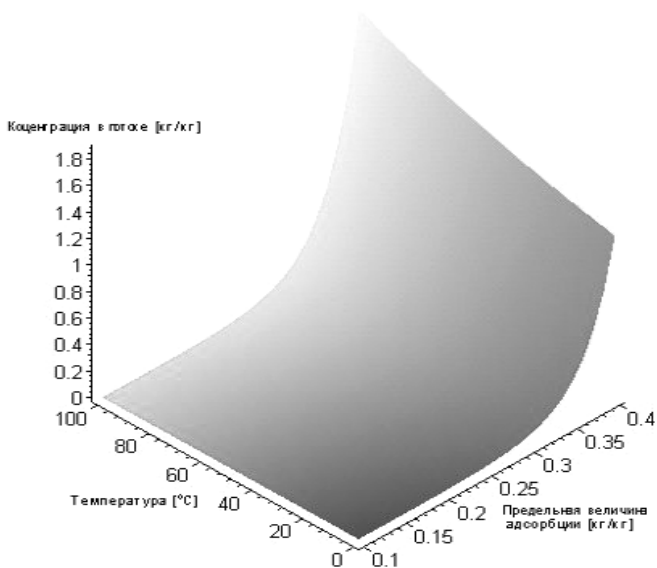


Рис. 2. Равновесная концентрация в потоке адсорбтива

Список литературы

1. Кафаров В.В. Математическое моделирование основных процессов химических производств: Учеб. / В.В. Кафаров, М.Б. Глебов. – М.: Высш шк., 1991. – 400 с.
2. Туголуков Е.Н. Математическое моделирование термонагруженных процессов и аппаратов многоассортиментных химических производств: Дисс ... докт. техн. наук. Тамбов, 2004. 400 с.
3. Лукин В.Д. Циклические адсорбционные процессы: Теория и расчет: Учеб./ В.Д. Лукин, А.В. Новосельский. – Л.: «Химия», 1989 г., -256 с.
4. Демидович Б. П. Основы вычислительной математики: / Б. П. Демидович, И. А. Марон. – М.: Государственное издательство физико-математической литературы, 1960. – 659 с.