Серия «Математика»
2012. Т. 5, № 3. С. 2—17

Онлайн-доступ к журналу:
http://isu.ru/izvestia

ИЗВЕСТИЯ
Иркутского государственного университета

УДК 517.97

Задача разделения смесей в ректификационных колоннах *

М. А. Аргучинцева
Иркутский государственный университет

В. П. Поплевко
Иркутский государственный университет

Аннотация. В данной статье исследована прикладная задача управления ректификационной колонной. Процесс предназначен для получения из многокомпонентной смеси продуктов с заданной концентрацией. Математическая модель процесса ректификации представляет собой систему гиперболических уравнений первого порядка. Граничные условия системы определяются из систем обыкновенных дифференциальных уравнений.

Ключевые слова: гиперболические уравнения, численные методы, ректификационная колонна

Введение

Интересным приложением задач оптимального управления является моделирование химических и технологических процессов в промышленности. Например, процесс ректификации широко применяется в нефтегазоперерабатывающей, химической, нефтехимической и других отраслях. Он предназначен для получения из многокомпонентной смеси продуктов с заданной концентрацией. Основу процесса ректификации составляет теплообмен, массообмен и гидродинамика взаимодействующих потоков. Этот процесс характеризуется большим числом параметров, связанных между собой сложными зависимостями, и описывается системами дифференциальных уравнений в частных производных [1]. Значительная часть параметров является функциями временной и

* Работа выполнена при финансовой поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009–2013 годы» и РФФИ (грант 11–01–00713).

пространственной координат. Цель управления процессом ректификации – поддержание заданного состава целевого продукта. Поставленная задача принадлежит классу задач оптимизации гиперболических систем с управляемыми дифференциальными связями на границе, где управления выбираются из класса гладких функций и удовлетворяют поточечным или интегральным ограничениям.

Поскольку на каждой итерации оптимизационного алгоритма приходится интегрировать сложную начально-краевую задачу для системы гиперболических уравнений, поэтому в данной работе авторы более подробно остановились на методе ее исследования.

1. Постановка задачи

Рассмотрим математическую модель процесса разделения смесей в ректификационных колоннах [1]:

$$\frac{\partial(H_x x_i)}{\partial t} - \frac{\partial(L x_i)}{\partial s} = k_{y_i}(y_i - y_i^*) + \Phi_{x_i},$$

$$\frac{\partial(H_y y_i)}{\partial t} + \frac{\partial(V y_i)}{\partial s} = k_{y_i}(y_i^* - y_i) + \Phi_{y_i},$$

$$\sum_{i=1}^{N} x_i = 1, \quad \sum_{i=1}^{N} y_i = 1, \quad i = \overline{1, N}.$$

Здесь $x_i = x_i(s,t)$, $y_i = y_i(s,t)$ – концентрации i-го компонента в жидкой и паровой фазах; $L = L(s,t)$, $V = V(s,t)$ – потоки жидкости и пара в колонне; $H_x = H_x(s,t)$, $H_y = H_y(s,t)$ – удерживающие способности колонны по жидкости и пару; $\Phi_{x_i} = \Phi_{x_i}(s,t)$, $\Phi_{y_i} = \Phi_{y_i}(s,t)$ – плотности вводимых потоков i-го компонента исходной смеси в жидкой и паровой фазах; $s \in [s_0, s_1]$ – координата вдоль ректификационной колонны; $t \in [t_0, t_1]$ – время. Коэффициент массопередачи в паровой фазе имеет вид:

$$k_{y_i} = k_y \equiv kV(s,t), \quad k = const.$$

Концентрация паровой компоненты в равновесной ситуации находится по формуле:

$$y_i^*(s,t) = \widetilde{p}(s,t) x_i(s,t),$$

где $\widetilde{p}(s,t)$ определяется из эксперимента.

Вверху и внизу колонны имеются две емкости – конденсатор ("d") и испаритель ("k"), в которых накапливаются соответствующие "легкие" и "тяжелые" компоненты разделения исходной смеси. Исследуем подробнее процессы массообмена, проходящие в испарителе. Поток ректификационной жидкости $L_k(t) = L(s_0, t)$, выходящий из нижней части колонны, поступает в испаритель ($s = s_0$). Часть потока испаряется в кипятильнике и возвращается в колонну в виде пара $V_k(t) = V(s_0, t)$. Другая часть отбирается в виде готового продукта $W(t)$. Таким образом, концентрация компонентов жидкости $x_{ki}(t)$, находящейся в испарителе, определяется из уравнения материального баланса [1]

$$\frac{d(H_{xk}(t)x_{ki}(t))}{dt} = L_k(t)x_i(s_0, t) - V_k(t)y_i(s_0, t) - W(t)x_{ki}(t),$$

$$x_{ki}(t_0) = x_{i0}(s_0), \quad i = \overline{1, N}.$$

Здесь $y_i(s_0, t)$ находится из дополнительного соотношения, учитывающего различные типы кипятильников, стоящих в испарителе,

$$y_i(s_0, t) = (y_i^*(s_0, t) - x_{ki}(t))a_k + x_{ki}(t),$$

$a_k = 0$ – для полного испарителя и $a_k = 1$ – для парциального испарителя. Общее количество жидкости в испарителе $H_{xk}(t)$ рассчитывается из уравнения

$$\frac{dH_{xk}(t)}{dt} = L_k(t) - V_k(t) - W(t), \quad H_{xk}(t_0) = H_{xk0}.$$

Рассмотрим уравнения массообмена в конденсаторе ($s = s_1$). Паровой поток $V_d(t) = V(s_1, t)$, выходящий вверху колонны, поступает в конденсатор. Часть потока жидкости, выходящего из конденсатора, отбирается в виде готового продукта $D(t)$, другая часть поступает в верхнюю часть колонны в виде потока орошения $L_d(t) = L(s_1, t)$. Уравнение покомпонентного материального баланса для концентрации жидкости в конденсаторе $x_{di}(t)$ [1]:

$$\frac{d(H_{xd}(t)x_{di}(t))}{dt} = V_d(t)y_{di}(t) - (L_d(t) + D(t))x_{di}(t),$$

$$x_{di}(t_0) = x_{i0}(s_1), \quad i = \overline{1, N},$$

где

$$y_{di}(t) = y_i(s_1, t) + a_d(y_i^*(s_1, t) - y_i(s_1, t)),$$

a_d - эффективность конденсатора ($a_d = 0$ – для полного конденсатора и $a_d = 1$ – для парциального конденсатора). Количество жидкости в конденсаторе $H_{xd}(t)$ определяется из уравнения общего материального баланса потоков:

$$\frac{dH_{xd}(t)}{dt} = V_d(t) - L_d(t) - D(t), \quad H_{xd}(t_0) = H_{xd0}.$$

Введем основные предположения:

1) подвод сырья осуществляется только в жидкой фазе в σ–окрестности точки $s = s_*$

$$\Phi_{y_i}(s,t) = 0,$$

$$\Phi_{x_i}(s,t) = x_{f_i} F_x(t)\phi_{x_i}(s), \quad s_* - \sigma \le s \le s_* + \sigma,$$

где x_{f_i} - концентрация компонента в жидкости потоков сырья, $F_x(t)$ - вводимый поток сырья, $\phi_{x_i}(s)$ - функция распределения потока по длинне колонны – заданные функции;

2) в ректификационной колонне с увеличением потоков $L(s,t)$ и $V(s,t)$ увеличиваются удерживающие способности $H_x(s,t)$ и $H_y(s,t)$. Будем считать эту зависимость прямо пропорциональной

$$\frac{L(s,t)}{H_x(s,t)} = c_1 = const, \quad \frac{V(s,t)}{H_y(s,t)} = c_2 = const;$$

3) поток пара в колонне зависит только от времени t и равен потокам пара в конденсаторе и испарителе:

$$V(s,t) \equiv V(t), \quad V(t) = V_d(t) = V_k(t);$$

4) потоки жидкости в колонне, конденсаторе и испарителе зависят только от времени t и определяются следующим образом:

$$L(s,t) \equiv L(t) + L^*(t),$$

$$L^*(t) = \begin{cases} F_x(t), & s_0 \le s < s_* - \sigma, \\ F_x(t) \int\limits_{s_*-\sigma}^{s_*+\sigma} \phi_{x_i}(s)\, ds, & s_* - \sigma \le s \le s_* + \sigma, \\ 0, & s_* + \sigma < s \le s_1, \end{cases}$$

$$L_d(t) = L(t), \qquad L_k(t) = L(t) + F_x(t);$$

5) должно выполняться следующее условие между количеством исходной смеси, вводимой в колонну, и потоками готовых продуктов, отбираемых в конденсаторе и испарителе: $F_x(t) \ge D(t) + W(t)$. Если колонна работает в "статическом" режиме (количество исходной смеси равно количеству готового продукта), справедливо строгое равенство в каждый момент времени t: $F_x(t) = D(t) + W(t)$ или за весь период работы колонны:

$$\int\limits_{t_0}^{t_1} [F_x(t) - D(t) - W(t)]\, dt = 0;$$

6) рассматривается случай полного испарителя ($a_k = 0$) и конденсатора ($a_d = 0$), тогда

$$x_{ki}(t) = y_i(s_0,t),$$

$$y_{di}(t) = y_i(s_1, t), \quad x_{di}(t) = x_i(s_1, t).$$

С учетом всех предположений система уравнений в частных производных примет вид:

$$\frac{\partial x_i(s,t)}{\partial t} - c_1 \frac{\partial x_i(s,t)}{\partial s} = A_1(s,t)x_i(s,t) + B_1(s,t)y_i(s,t) + F_1(s,t),$$

$$\frac{\partial y_i(s,t)}{\partial t} + c_2 \frac{\partial y_i(s,t)}{\partial s} = A_2(s,t)x_i(s,t) + B_2(s,t)y_i(s,t) + F_2(s,t), \quad (1)$$

где

$$A_1(s,t) = \frac{c_1 F_x(t)\phi_{xi}(s) - c_1 k V(t)\widetilde{p}(s,t) - (L(t) + L^*(t))'}{L(t) + L^*(t)},$$

$$A_2(s,t) = c_2 k \widetilde{p}(s,t), \;\; F_1(s,t) = \frac{c_1 F_x(t)\phi_{xi}(s)}{L(t) + L^*(t)}, \;\; F_2(s,t) = 0,$$

$$B_1(s,t) = \frac{c_1 k V(t)}{L(t) + L^*(t)}, \quad B_2(s,t) = -(kc_2 + \frac{V'(t)}{V(t)}),$$

$$\sum_{i=1}^{N} x_i(s,t) = 1, \;\; \sum_{i=1}^{N} y_i(s,t) = 1, \;\; x_i(s,t) > 0, \;\; y_i(s,t) > 0,$$

$$s_0 < s < s_1, \;\; t_0 < t \le t_1, \;\; i = \overline{1,N}.$$

Начальные условия имеют вид:

$$x_i(s,t_0) = x_{i0}(s), \;\; y_i(s,t_0) = y_{i0}(s), \;\; s_0 \le s \le s_1, \;\; i = \overline{1,N}. \quad (2)$$

Граничные условия при $t_0 \le t \le t_1$ на границе $s = s_0$:

$$\frac{d(H_{xk}(t)y_i(s_0,t))}{dt} = [L(t) + F_x(t)]x_i(s_0,t) - [V(t) + W(t)]y_i(s_0,t),$$

$$y_i(s_0,t_0) = y_{i0}(s_0), \;\; i = \overline{1,N};$$

$$\frac{dH_{xk}(t)}{dt} = L(t) + F_x(t) - V(t) - W(t), \quad H_{xk}(t_0) = H_{xk0}; \quad (3)$$

и на границе $s = s_1$:

$$\frac{d(H_{xd}(t)x_i(s_1,t))}{dt} = V(t)y_i(s_1,t) - [L(t) + D(t)]x_i(s_1,t),$$

$$x_i(s_1,t_0) = x_{i0}(s_1), \;\; i = \overline{1,N};$$

$$\frac{dH_{xd}(t)}{dt} = V(t) - L(t) - D(t), \quad H_{xd}(t_0) = H_{xd0}. \quad (4)$$

Параметры задачи c_1, c_2, k, s_0, s_1, s_*, t_0, t_1, σ, H_{xk0}, H_{xd0}, $\widetilde{p}(s,t)$, $F_x(t)$, $\phi_{x_i}(s)$, x_{fi}, $x_{i0}(s)$, $y_{i0}(s)$ считаются заданными.

Поставим задачу оптимального управления процессами разделения смеси в ректификационной колонне, описываемую гиперболической системой первого порядка (1) с начальными условиями (2) и граничными условиями (3), (4). В качестве управлений здесь выбираются потоки готовых продуктов, отбираемых в испарителе $W(t)$ и конденсаторе $D(t)$. Особенностью является то, что управления входят в правые части дифференциальных связей (3), (4) на границах потока $s = s_0$ и $s = s_1$. Предполагается, что $W(t)$ и $D(t)$ принадлежат классу гладких функций.

В качестве целевого функционала J задается суммарное отклонение концентраций в выходных потоках $x_{di}(t), x_{ki}(t)$ от заданных значений $\theta_{1i},\ \ \theta_{2i},\ \ i = \overline{1,N}$:

$$J = \sum_{i=1}^{N} \int_{t_0}^{t_1} [K_{1i}(x_{di}(t) - \theta_{1i})^2 + K_{2i}(x_{ki}(t) - \theta_{2i})^2]\, dt \to min,$$

который в случае полного испарителя и конденсатора принимает вид

$$J = \sum_{i=1}^{N} \int_{t_0}^{t_1} [K_{1i}(x_i(s_1,t) - \theta_{1i})^2 + K_{2i}(y_i(s_0,t) - \theta_{2i})^2]\, dt \to min. \qquad (5)$$

Здесь $K_{1i},\ \ K_{2i}$ - весовые коэффициенты, определяющие ценность продукта.

Таким образом, задача (1)-(5) принадлежит классу задач оптимизации гиперболических систем с управляемыми дифференциальными связями на границе, где управления выбираются из класса гладких функций и удовлетворяют поточечным (интегральным) ограничениям. В работе [1] данная задача рассматривалась в классе кусочно-непрерывных функций. Методика [2,3] позволяет исследовать ее в классе гладких управляющих функций.

На каждой итерации оптимизационного алгоритма приходится интегрировать начально-краевую задачу для системы гиперболических уравнений (1)-(4), поэтому более подробно остановимся на методе ее исследования.

2. Метод исследования

Одним из наиболее эффективных методов исследования систем гиперболических уравнений является метод характеристик [4]. Он заключается в отыскании кривых, называемых характеристиками, вдоль которых уравнения в частных производных превращаются в обыкновенные дифференциальные характеристические уравнения. Отличительной особенностью метода, по сравнению с другими разностными алгоритмами, является минимальное использование операторов интерполирования и, в связи с этим, максимальная близость области зависимости разностной схемы и области зависимости системы дифференциальных уравнений.

В области $S \times T$, $(S = [s_0, s_1], \quad T = [t_0, t_1])$ построим характеристическую разностную сетку, узлы которой являются пересечениями характеристик первого $(s^{(1)})$ и второго $(s^{(2)})$ семейств, задаваемых уравнениями:

$$\frac{ds^{(1)}}{dt} = c_1, \quad \frac{ds^{(1)}}{dt} = -c_2.$$

В общем случае характеристическая сетка является криволинейной, что существенно затрудняет численную реализацию метода характеристик из-за сложной логики построения фронта расчета. Однако в данном случае из физической специфики задачи о ректификационной колонне (1)–(4) вытекает, что производственные коэффициенты

$$c_1 = const, \quad c_2 = const.$$

Следовательно, характеристики обоих семейств представляют собой прямые линии, и можно построить разностную сетку, свободную от указанного недостатка.

Разобьем отрезок $S = [s_0, s_1]$ на m равных частей $[s_j, s_{j+1}]$, положив $s_j = s_0 + j\triangle s$, $j = 0, 1, \ldots, m$; $\triangle s = \frac{s_1 - s_0}{m}$. Через точку $s = s_1$ проведем нулевую характеристику второго семейства $s^{(2)}$. На этой характеристике отметим точки $M_j(s_j, u_j)$, где координаты u_j вычисляются по правилу:

$$u_j = t_0 + \frac{s_j - s_1}{c_2}, \ \ j = 0, 1, \ldots, m$$

.

Из точек M_j, $j = 0, \ldots, m$ выпускаем характеристики первого семейства $s^{(1)}$ и найдем точки их пересечения с осью $t = t_0$:

$$q_{1j} = s_j + c_1(u_j - t_0), \ \ j = 0, \ldots, m,$$

$$s_0 \le q_{1j} \le s_1.$$

В точках q_{1j}, $j = 0, \ldots, m$ задаются начальные условия (2) для характеристик обоих семейств.

Из точек пересечения характеристики первого семейства $s^{(1)}$ с прямой $s = s_0$:

$$t_{i0} = u_0 + i\triangle t, \ \ \triangle t = (\frac{1}{c_1} + \frac{1}{c_2})\triangle s, \ \ i = 0, 1, \ldots, R$$

проводим характеристики второго семейства $s^{(2)}$. Здесь R – номер последней характеристики второго семейства, попадающей в допустимую область $S \times T$. Точки пересечения характеристик $s^{(2)}$ с прямой $s = s_1$ имеют вид:

$$t_{im} = u_m + i\triangle t, \;\; i = 0, 1, \dots, n.$$

В точках пересечения характеристик второго семейства с прямой $t = t_0$:

$$q_{2i} = s_1 + c_2(t_0 - t_{im}), \;\; i = 0, 1, \dots, R,$$

$$s_0 \le q_{2i} \le s_1$$

задаем начальные условия (2).

Точки пересечения характеристик первого и второго семейства определяются по формулам:

$$t_{ij} = u_j + i\triangle t, \;\; i = 0, 1, \dots, R, \;\; j = 0, 1, \dots, m, \;\; t_{ij} \in S \times T.$$

Таким образом получили характеристическую разностную сетку с узлами $(s_j, t_{ij}), \;\; i = 0, 1, \dots, R, \;\; j = 0, 1, \dots, m$.

Введем следующие обозначения:

1) значение функции в узле характеристической сетки (s_j, t_{ij}) будем обозначать индексами $[\dots](s_j, t_{ij}) \sim [\dots]_{i,j}$,

2) $\rho_1 = t_{ij} - t_{i-1,j+1}$, $\rho_2 = t_{ij} - t_{i,j-1}$,

3) $\triangle t = t_{ij} - t_{i-1,j}$.

Выведем расчетные формулы для внутренних точек области $S \times T$. Первое из уравнений (1) интегрируется по формуле трапеций вдоль характеристики первого семейства $(s^{(1)})$ в направлении $t_{i-1,j+1} \to t_{ij}$, а второе – вдоль характеристики второго семейства $(s^{(2)})$ в направлении $t_{i,j-1} \to t_{ij}$. Тогда получим следующую неявную разностную схему:

$$\frac{x_{i,j} - x_{i-1,j+1}}{\rho_1} = \frac{1}{2}\{A_{1i,j}x_{i,j} + B_{1i,j}y_{i,j} + F_{1i,j} +$$
$$+ A_{1i-1,j+1}x_{i-1,j+1} + B_{1i-1,j+1}y_{i-1,j+1} + F_{1i-1,j+1}\},$$

$$\frac{y_{i,j} - y_{i,j-1}}{\rho_2} = \frac{1}{2}\{A_{2i,j}x_{i,j} + B_{2i,j}y_{i,j} + F_{2i,j} +$$
$$+ A_{2i,j-1}x_{i,j-1} + B_{2i,j-1}y_{i,j-1} + F_{2i,j-1}\}.$$

Введем обозначения:

$$D^{i-1}_{j+1} = x_{i-1,j+1} + \frac{\rho_1}{2}\{A_{1i-1,j+1}x_{i-1,j+1} + B_{1i-1,j+1}y_{i-1,j+1} + F_{1i-1,j+1}\},$$

$$Q^{i}_{j-1} = y_{i,j-1} + \frac{\rho_2}{2}\{A_{2i,j-1}x_{i,j-1} + B_{2i,j-1}y_{i,j-1} + F_{2i,j-1}\}.$$

Тогда наша система примет вид:

$$x_{i,j} = \frac{\rho_1}{2} A_{1i,j} x_{i,j} + \frac{\rho_1}{2} B_{1i,j} y_{i,j} + (\frac{\rho_1}{2} F_{1i,j} + D_{j+1}^{i-1}),$$

$$y_{i,j} = \frac{\rho_2}{2} A_{2i,j} x_{i,j} + \frac{\rho_2}{2} B_{2i,j} y_{i,j} + (\frac{\rho_2}{2} F_{2i,j} + Q_{j-1}^{i}).$$

Рассматривая данные выражения для неявной разностной схемы как систему двух линейных алгебраических уравнений относительно $x_{i,j}$ и $y_{i,j}$:

$$(1 - \frac{\rho_1}{2} A_{1i,j}) x_{i,j} - \frac{\rho_1}{2} B_{1i,j} y_{i,j} = \frac{\rho_1}{2} F_{1i,j} + D_{j+1}^{i-1},$$

$$-\frac{\rho_2}{2} A_{2i,j} x_{i,j} + (1 - \frac{\rho_2}{2} B_{2i,j}) y_{i,j} = \frac{\rho_2}{2} F_{2i,j} + Q_{j-1}^{i},$$

можно получить явные формулы перерасчета разностного решения на i-ом слое по формулам Крамера:

$$x_{i,j} = \frac{\Delta_{x_{ij}}}{\Delta}, \quad y_{i,j} = \frac{\Delta_{y_{ij}}}{\Delta},$$

где

$$\Delta = \begin{vmatrix} (1 - \frac{\rho_1}{2} A_{1i,j}) & -\frac{\rho_1}{2} B_{1i,j} \\ -\frac{\rho_2}{2} A_{2i,j} & (1 - \frac{\rho_2}{2} B_{2i,j}) \end{vmatrix},$$

$$\Delta_{x_{ij}} = \begin{vmatrix} (\frac{\rho_1}{2} F_{1i,j} + D_{j+1}^{i-1}) & -\frac{\rho_1}{2} B_{1i,j} \\ (\frac{\rho_2}{2} F_{2i,j} + Q_{j-1}^{i}) & (1 - \frac{\rho_2}{2} B_{2i,j}) \end{vmatrix},$$

$$\Delta_{y_{ij}} = \begin{vmatrix} (1 - \frac{\rho_1}{2} A_{1i,j}) & (\frac{\rho_1}{2} F_{1i,j} + D_{j+1}^{i-1}) \\ -\frac{\rho_2}{2} A_{2i,j} & (\frac{\rho_2}{2} F_{2i,j} + Q_{j-1}^{i}) \end{vmatrix}.$$

Окончательно с учетом обозначений:

$$M_{i,j}^{(1)} = R_{ij}[\frac{\rho_1 \rho_2}{4}(B_{1i,j} F_{2i,j} - B_{2i,j} F_{1i,j}) + \frac{\rho_1}{2} F_{1i,j}],$$

$$M_{i,j}^{(2)} = R_{ij}[-\frac{\rho_1 \rho_2}{4}(A_{1i,j} F_{2i,j} - A_{2i,j} F_{1i,j}) + \frac{\rho_2}{2} F_{2i,j}],$$

$$N_{i,j}^{(1)} = R_{ij}[(1 - \frac{\rho_2}{2} B_{2i,j}) \frac{\rho_1}{2} F_{1i-1,j+1} + \frac{\rho_1}{2} B_{1i,j} \frac{\rho_2}{2} F_{2i,j-1}],$$

$$N_{i,j}^{(2)} = R_{ij}[\frac{\rho_2}{2} A_{2i,j} \frac{\rho_1}{2} F_{1i-1,j+1} + (1 - \frac{\rho_1}{2} A_{1i,j}) \frac{\rho_2}{2} F_{2i,j-1}],$$

$$S_{i,j}^{(1)} = R_{ij}(1 - \frac{\rho_2}{2} B_{2i,j})(1 + \frac{\rho_1}{2} A_{1i-1,j+1}),$$

$$S_{i,j}^{(2)} = R_{ij} \frac{\rho_2}{2} A_{2i,j}(1 + \frac{\rho_1}{2} A_{1i-1,j+1}),$$

$$V_{i,j}^{(1)} = R_{ij}(1 - \frac{\rho_2}{2}B_{2i,j})\frac{\rho_1}{2}B_{1i-1,j+1},$$

$$V_{i,j}^{(2)} = R_{ij}\frac{\rho_2}{2}A_{2i,j}\frac{\rho_1}{2}B_{1i-1,j+1},$$

$$T_{i,j}^{(1)} = R_{ij}\frac{\rho_1}{2}B_{1i,j}\frac{\rho_2}{2}A_{2i,j-1},$$

$$T_{i,j}^{(2)} = R_{ij}(1 - \frac{\rho_1}{2}A_{1i,j})\frac{\rho_2}{2}A_{2i,j-1},$$

$$W_{i,j}^{(1)} = R_{ij}\frac{\rho_1}{2}B_{1i,j}(1 + \frac{\rho_2}{2}B_{2i,j-1}),$$

$$W_{i,j}^{(2)} = R_{ij}(1 - \frac{\rho_1}{2}A_{1i,j})(1 + \frac{\rho_2}{2}B_{2i,j-1})$$

получим явные формулы перерасчета разностного решения на i-м слое по заданным значениям на $(i-1)$-м слое:

$$x_{i,j} = S_{i,j}^{(1)}x_{i-1,j+1} + T_{i,j}^{(1)}x_{i,j-1} + V_{i,j}^{(1)}y_{i-1,j+1} + W_{i,j}^{(1)}y_{i,j-1} + M_{i,j}^{(1)} + N_{i,j}^{(1)},$$

$$y_{i,j} = S_{i,j}^{(2)}x_{i-1,j+1} + T_{i,j}^{(2)}x_{i,j-1} + V_{i,j}^{(2)}y_{i-1,j+1} + W_{i,j}^{(2)}y_{i,j-1} + M_{i,j}^{(2)} + N_{i,j}^{(2)} \quad (6)$$

для внутренних точек (s_j, t_{ij}) области $S \times T$. Предлагаемая разностная схема (6) является устойчивой и обеспечивает второй порядок аппроксимации.

Получим расчетные формулы на границе $s = s_1$, где должны выполняться условия (4). Рассмотрим два случая:

1. Удерживающая способность конденсатора $H_{xd} = H_{xd0} = const$, т.е. рассматривается режим работы ректификационной колонне, при котором количество жидкости в конденсаторе постоянно. Тогда условия (4) перепишутся в виде:

$$\frac{dx(s_1,t)}{dt} = \frac{L(t)+D(t)}{H_{xd0}}(y(s_1,t) - x(s_1,t)), \quad x(s_1,t_0) = x_0(s_1).$$

2. Удерживающая способность конденсатора меняется с течением времени $H_{xd} = H_{xd}(t)$. Тогда

$$\frac{dx(s_1,t)}{dt} = \frac{V(t)}{H_{xd}(t)}(y(s_1,t) - x(s_1,t)), \quad x(s_1,t_0) = x_0(s_1),$$

$$\frac{dH_{xd}(t)}{dt} = V(t) - L(t) - D(t), \quad H_{xd}(t_0) = H_{xd0}.$$

К границе $s = s_1$ подходят характеристики второго семейства $s^{(2)}$, на которых:

$$\frac{dy(s_1,t)}{dt} = A_2(s_1,t)x(s_1,t) + B_2(s_1,t)y(s,t) + F_2(s_1,t).$$

Запишем, используя формулу трапеций, разностные аналоги этих уравнений в случае $H_{xd} = H_{xd0} = const$:

$$x_{i,m} - x_{i-1,m} = \frac{\triangle t}{2}\{K_{di,m}(y_{i,m} - x_{i,m}) + K_{di-1,m}(y_{i-1,m} - x_{i-1,m})\},$$

$$y_{i,m} - y_{i,m-1} = \frac{\rho_2}{2}\{A_{2i,m-1}x_{i,m-1} + B_{2i,m-1}y_{i,m-1} + F_{2i,m-1}+$$

$$+A_{2i,m}x_{i,m} + B_{2i,m}y_{i,m} + F_{2i,m}\}, \quad i = 0, 1, \ldots, n,$$

где

$$K_{di,m} = \frac{L_{i,m} + D_{i,m}}{H_{xd0}}, \quad K_{di-1,m} = \frac{L_{i-1,m} + D_{i-1,m}}{H_{xd0}},$$

Перепишем последние выражения в более удобном виде:

$$(-\frac{\rho_2}{2}A_{2i,m})x_{i,m} + (1 - \frac{\rho_2}{2}B_{2i,m})y_{i,m} = (\frac{\rho_2}{2}A_{2i,m-1})x_{i,m-1}+$$

$$+(1 + \frac{\rho_2}{2}B_{2i,m-1})y_{i,m-1} + \frac{\rho_2}{2}(F_{2i,m-1} + F_{2i,m}),$$

$$(1 + \frac{\triangle t}{2}K_{di,m})x_{i,m} + (-\frac{\triangle t}{2}K_{di,m})y_{i,m} = (1 - \frac{\triangle t}{2}K_{di-1,m})x_{i-1,m}+$$

$$+\frac{\triangle t}{2}K_{di-1,m}y_{i-1,m}.$$

Решим систему линейных алгебраических уравнений относительно $x_{i,m}$ и $y_{i,m}$. Тогда с учетом обозначений:

$$G_d{}^{(1)}(i) = \lambda_d(i)(\frac{\rho_2}{2}B_{2i,m} - 1)[1 - \frac{\triangle t}{2}K_{di-1,m}],$$

$$G_d{}^{(2)}(i) = -\lambda_d(i)\frac{\rho_2}{2}A_{2i,m}(1 - \frac{\triangle t}{2}K_{di-1,m}),$$

$$P_d{}^{(1)}(i) = \lambda_d(i)(\frac{\rho_2}{2}B_{2i,m} - 1)\frac{\triangle t}{2}K_{di-1,m},$$

$$P_d{}^{(2)}(i) = -\lambda_d(i)\frac{\rho_2\triangle t}{4}K_{di-1,m},$$

$$\omega_d{}^{(1)}(i) = -\lambda_d(i)\frac{\rho_2\triangle t}{4}K_{di,m}(F_{2i,m-1} + F_{2i,m}),$$

$$\omega_d{}^{(2)}(i) = -\lambda_d(i)\frac{\rho_2}{2}(F_{2i,m} + F_{2i,m-1})(1 + \frac{\triangle t}{2}K_{di,m}),$$

$$\eta_d{}^{(1)}(i) = -\lambda_d(i)\frac{\triangle t}{2}K_{di,m}(1 + \frac{\rho_2}{2}B_{2i,m-1}),$$

$$\eta_d{}^{(2)}(i) = -\lambda_d(i)(1 + \frac{\rho_2}{2}B_{2i,m-1})(1 + \frac{\triangle t}{2}K_{di,m}),$$

$$\mu_d{}^{(1)}(i) = -\lambda_d(i)\frac{\rho_2\triangle t}{4}A_{2i,m-1}K_{di,m}$$

$$\mu_d{}^{(2)}(i) = -\lambda_d(i)\frac{\rho_2}{2}A_{2i,m-1}(1+\frac{\triangle t}{2}K_{di,m})$$

получили явные расчетные формулы на границе $s = s_1$:

$$x_{i,m}{=}\mu_d{}^{(1)}(i)x_{i,m-1}{+}\eta_d{}^{(1)}(i)y_{i,m-1}{+}G_d{}^{(1)}(i)x_{i-1,m}+P_d{}^{(1)}(i)y_{i-1,m}+\omega_d{}^{(1)}(i),$$

$$y_{i,m}{=}\mu_d{}^{(2)}(i)x_{i,m-1}{+}\eta_d{}^{(2)}(i)y_{i,m-1}{+}G_d{}^{(1)}(i)x_{i-1,m}+P_d{}^{(2)}(i)y_{i-1,m}+\omega_d{}^{(2)}(i). \tag{7}$$

Здесь $x_{0,m},\ y_{0,m}$ известны из начальных условий (2).

Аналогичная процедура проводится и в случае $H_{xd} = H_{xd}(t)$, для которого будут справедливы формулы (7) с точностью до значений коэффициентов:

$$K_{di,m} = \frac{V_{i,m}}{H_{xdi}}, \quad K_{di-1,m} = \frac{V_{i-1,m}}{H_{xdi-1}},$$

$$H_{xdi} = H_{xdi-1} + \frac{\triangle t}{2}\{V_{i,m} + V_{i-1,m} - L_{i,m} - L_{i-1,m} - D_{i,m} - D_{i-1,m}\}.$$

Рассмотрим условия в испарителе ($s = s_0$). Возможны два случая:

1. Удерживающая способность испарителя $H_{xk} = H_{xk0} = const$. Тогда условия (3) примут вид:

$$\frac{dy(s_0,t)}{dt} = \frac{V(t)+W(t)}{H_{xk0}}(x(s_0,t) - y(s_0,t)), \quad y(s_0,t_0) = y_0(s_0).$$

2. Удерживающая способность испарителя меняется с течением времени $H_{xk} = H_{xk}(t)$. Тогда

$$\frac{dy(s_0,t)}{dt} = \frac{L(t)+F_x(t)}{H_{xk(t)}}(x(s_0,t) - y(s_0,t)), \quad y(s_0,t_0) = y_0(s_0);$$

$$\frac{dH_{xk}(t)}{dt} = L(t) + F_x(t) - V(t) - W(t), \quad H_{xk}(t_0) = H_{xk0}.$$

К границе $s = s_0$ подходят характеристики первого семейства $s^{(1)}$, на которых:

$$\frac{dx(s_0,t)}{dt} = A_1(s_0,t)x(s_0,t) + B_1(s_0,t)y(s_0,t) + F_1(s_0,t).$$

Запишем разностные аналоги этих уравнений, используя формулу трапеций:

$$y_{i,0} - y_{i-1,0} = \frac{\triangle t}{2}\{K_{ki,0}(x_{i,0} - y_{i,0}) + K_{ki-1,0}(x_{i-1,0} - y_{i-1,0})\},$$

$$x_{i,0} - x_{i-1,1} = \frac{\rho_1}{2}\{A_{1i,0}x_{i,0} + B_{1i,0}y_{i,0} + F_{1i,0}+$$
$$+A_{1i-1,1}x_{i-1,1} + B_{1i-1,1}y_{i-1,1} + F_{1i-1,1}\},$$

где

$$K_{ki,0} = \frac{V_{i,0} + W_{i,0}}{H_{xk0}}, \quad K_{ki-1,0} = \frac{V_{i-1,0} + W_{i-1,0}}{H_{xk0}}.$$

Перепишем в более удобном виде:

$$(1 - \frac{\rho_1}{2}A_{1i,0})x_{i,0} + (-\frac{\rho_1}{2}B_{1i,0})y_{i,0} = (1 + \frac{\rho_1}{2}A_{1i-1,1})x_{i-1,1}+$$
$$+\frac{\rho_1}{2}B_{1i-1,1}y_{i-1,1} + \frac{\rho_1}{2}(F_{1i,0} + F_{1i-1,1}),$$
$$-\frac{\triangle t}{2}K_{ki,0}x_{i,0} + (1 + \frac{\triangle t}{2}K_{ki,0})y_{i,0} = \frac{\triangle t}{2}K_{ki-1,0}(x_{i-1,0}+$$
$$+(1 - \frac{\triangle t}{2}K_{ki-1,0})y_{i-1,0}.$$

С учетом обозначений:

$$G_k{}^{(1)}(i) = \beta_i\frac{\rho_1\triangle t}{4}B_{1i,0}K_{ki-1,0},$$
$$G_k{}^{(2)}(i) = \beta_i\frac{\triangle t}{2}(1 - \frac{\rho_1}{2}A_{1i,0})K_{ki,0},$$
$$P_k{}^{(1)}(i) = \beta_i\frac{\rho_1}{2}B_{1i,0}(1 - \frac{\triangle t}{2}K_{ki-1,0}),$$
$$P_k{}^{(2)}(i) = \beta_i(1 - \frac{\rho_1}{2}A_{1i,0})(1 - \frac{\triangle t}{2}K_{ki-1,0}),$$
$$\omega_k{}^{(1)}(i) = \beta_i(1 + \frac{\triangle t}{2}K_{ki,0})\frac{\rho_1}{2}(F_{1i,0} + F_{1i-1,1}),$$
$$\omega_k{}^{(2)}(i) = \beta_i\frac{\rho_1\triangle t}{4}K_{ki,0}(F_{1i,0} + F_{1i-1,1}),$$
$$\eta_k{}^{(1)}(i) = \beta_i(1 + \frac{\triangle t}{2}K_{ki,0})\frac{\rho_1}{2}B_{1i-1,1},$$
$$\eta_k{}^{(2)}(i) = \beta_i\frac{\rho_1\triangle t}{4}B_{1i-1,1}K_{ki,0},$$
$$\mu_k{}^{(1)}(i) = \beta_i[(1 + \frac{\triangle t}{2}K_{ki,0})(1 + \frac{\rho_1}{2}A_{1i-1,1})],$$
$$\mu_k{}^{(2)}(i) = \beta_i\frac{\triangle t}{2}K_{ki,0}(1 + \frac{\rho_1}{2}A_{1i-1,1}).$$

расчетные формулы имеют следующий вид:

$$x_{i,0} = G_k{}^{(1)}(i)x_{i-1,0}+P_k{}^{(1)}(i)y_{i-1,0}+\eta_k{}^{(1)}(i)y_{i-1,1}+\mu_k{}^{(1)}(i)x_{i-1,1}+\omega_k{}^{(1)}(i),$$

$$y_{i,0} = G_k{}^{(2)}(i)x_{i-1,0} + P_k{}^{(2)}(i)y_{i-1,0} + \eta_k{}^{(2)}(i)y_{i-1,1} + \mu_k{}^{(2)}(i)x_{i-1,1} + \omega_k{}^{(2)}(i),$$
$$i = n_*, \ldots, R, \tag{8}$$

где n_* – номер первой характеристики второго семейства, пересекшей прямую $s = s_0$.

Аналогично рассматривается случай $H_{xk} = H_{xk}(t)$ для системы разностных уравнений, где

$$K_{ki,0} = \frac{L_{i,0} + F_{xi,0}}{H_{xki}}, \quad K_{ki-1,0} = \frac{L_{i-1,0} + F_{xi-1,0}}{H_{xki-1}}.$$

$$H_{xki} = H_{xki-1} + \frac{\triangle t}{2}\{F_{xi,0} + F_{xi-1,0} + L_{i,0} + L_{i-1,0} - V_{i,0} - V_{i-1,0} - W_{i,0} - W_{i-1,0}\}.$$

Таким образом, и в этом случае расчетные формулы на границе $s = s_0$ имеют вид (8).

Для проверки правильности построения разностной сетки и эффективности введенных конечно-разностных схем, решим несколько тестовых задач, сравнивая полученные решения с аналитическими.

Пример 1.
Рассмотрим задачу:

$$\frac{\partial x(s,t)}{\partial t} - c_1\frac{\partial x(s,t)}{\partial s} = -c_1 x(s,t) - \frac{e^s}{s+2}y(s,t),$$

$$\frac{\partial y(s,t)}{\partial t} + c_2\frac{\partial y(s,t)}{\partial s} = \frac{s+2}{e^s}x(s,t) + \frac{c_2}{s+2}y(s,t),$$

$$c_1 = 1,\ c_2 = 3$$

с граничными условиями:

$$\frac{dy(s_0,t)}{dt} = \frac{2cost}{cost - 2sint}(x(s_0,t) - y(s_0,t)),$$

$$\frac{dx(s_1,t)}{dt} = \frac{-e^{s_1}sint}{(s_1+2)sint - e^{s_1}cost}(y(s_1,t) - x(s_1,t))$$

и начальными условиями:

$$x(s,0) = e^s, \ \ y(s,0) = 0.$$

Аналитическое решение поставленной задачи имеет вид:

$$x^*(s,t) = e^s cost, \ \ y^*(s,t) = (s+2)sint.$$

Предложенный характеристический численный алгоритм реализован в системе MatLab 7.0. Сравнение результатов расчетов $x(s,t), \ y(s,t)$

с аналитическим решением $x^*(s,t),\ y^*(s,t)$ показало, что даже на достаточно крупной сетке при $s \in [0,2],\ t \in [0,4],\ m = 60$ погрешности численного решения имеют вид: $\max\limits_{t\in T}|x^* - x| = 0,00056;\ \ \max\limits_{t\in T}|y^* - y| = 0,00027$.

Пример 2.

Дана задача:

$$\frac{\partial x(s,t)}{\partial t} - c_1\frac{\partial x(s,t)}{\partial s} = -c_1 x(s,t) - \frac{e^s}{s+2}y(s,t),$$

$$\frac{\partial y(s,t)}{\partial t} + c_2\frac{\partial y(s,t)}{\partial s} = \frac{s+2}{e^s}x(s,t) + \frac{c_2}{s+2}y(s,t),$$

$$c_1 = 1,\ c_2 = 3.$$

Граничные условия:

$$\frac{d(H_{xk}(t)y(s_0,t))}{dt} = 2cost x(s_0,t) - (4cost + sint)y(s_0,t),$$

$$\frac{dH_{xk}(t)}{dt} = -2cost - sint,\ H_{xk}(0) = 1;$$

$$\frac{d(H_{xd}(t)x_d(t))}{dt} = e^{s_1}sint y(s_1,t) - (2e^{s_1}sint + (s_1+2)cost)x(s_1,t),$$

$$\frac{dH_{xd}(t)}{dt} = -e^{s_1}sint - (s_1+2)cost,\ H_{xd}(0) = e^{s_1}.$$

Начальные условия:

$$x(s,0) = e^s,\ \ y(s,0) = 0.$$

Аналитическое решение задачи:

$$x^*(s,t) = e^s cost,\ \ y^*(s,t) = (s+2)sint.$$

Результаты расчетов при $s \in [0,2],\ t \in [0,4],\ m = 60$ дали следующие погрешности численного решения: $\max\limits_{t\in T}|x^* - x| = 0,00063;\ \ \max\limits_{t\in T}|y^* - y| = 0,00031$.

Список литературы

1. Демиденко Н. Д. Моделирование и оптимизация систем с распределенными параметрами / Н. Д. Демиденко, В. И. Потапов, Ю. И. Шокин. – Новосибирск : Наука, 2006. – 551 с.
2. Аргучинцев А. В. Оптимальное управление гиперболическими системами / А. В. Аргучинцев. – М. : Физматлит, 2007. – 168 с.

3. Аргучинцев А. В. Оптимальное управление граничными условиями гиперболической системы на примере задачи химической ректификации / А. В. Аргучинцев, В. П. Поплевко // Тр. XV Байк. междунар. школы-семинара «Методы оптимизации и их приложения», п. Листвянка, оз. Байкал, 23–29 июня 2011 г. – Иркутск : РИО ИДСТУ СО РАН, 2011. – Т. 3. – С. 36–40.
4. Рождественский Б. Л. Системы квазилинейных уравнений и их приложения к газовой динамике / Б. Л. Рождественский, Н. Н. Яненко. – М. : Наука, 1978. – 686 с.

M.A. Arguchintceva, V.P. Poplevko

A problem of fractionization process in a tower

Abstract. In this paper a process of fractionization in a tower is considered. This process is described by a system of first-order partial differential equations. The numerical experiment is carried out.

Keywords: hyperbolic partial differential equations, computational methods, fractionization in a tower

Аргучинцева Маргарита Александровна,
кандидат физико-математических наук, доцент, Институт математики, экономики и информатики, Иркутский государственный университет, 664003, Иркутск, ул. К. Маркса, 1 (marguch@math.isu.ru)

Поплевко Василиса Павловна,
кандидат физико-математических наук, доцент, Институт математики, экономики и информатики, Иркутский государственный университет, 664003, Иркутск, ул. К. Маркса, 1 (vasilisa@math.isu.ru)

Arguchintceva Margarita, associate professor, Irkutsk State University, 1, K. Marks St., Irkutsk, 664003 (marguch@math.isu.ru)

Poplevko Vasilisa, associate professor, Irkutsk State University, 1, K. Marks St., Irkutsk, 664003 (vasilisa@math.isu.ru)