

SOLIDSIM-DYNAMICS – СИСТЕМА МОДЕЛИРОВАНИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ТВЕРДОФАЗНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Maksym Dosta, Stefan Heinrich

Institute of Solids Processes Engineering and Particles Technology, Hamburg
University of Technology, Denickestr. 15, 21073 Hamburg, Germany

1. Введение. Численное моделирование технологических схем представляет собой решение массовых и энергетических балансов, а также вычисление значений основных параметров процесса при различных его конфигурациях. Специально для стационарного моделирования технологических процессов твердофазных материалов была разработана моделирующая среда SolidSim [1]. SolidSim работает по принципу блочно-ориентированного метода моделирования и включает в себя:

- одновременное моделирование жидкой и твердой фазы;
- возможность моделирования схем различной конфигурации без ограничений под определенный тип процесса;
- наличие библиотеки моделей аппаратов, которая может расширяться пользовательскими моделями;
- стандартизированный интерфейс для коммуникации с другими программными системами. В качестве стандарта был использован стандарт CAPE-Open (CAPE-Open Laboratories Network, www.co-lan.org) [2].

Расширение существующей системы для динамического моделирования позволит:

- моделировать переходные процессы при изменении типа производимого продукта;
- осуществлять оптимизацию динамических процессов и их управление;
- вычислять периодические процессы, а также поведение процессов при старте или остановке производственного цикла;
- выполнять анализ чувствительности процесса к различным параметрам.

В представленной работе был выполнен анализ существующих методов моделирования и разработана стратегия вычислений, которая была реализована в системе SolidSim-Dynamics.

2. Метод моделирования

С точки зрения численного моделирования технологических схем могут быть выделены два основных подхода [3]:

- блочно-ориентированный (последовательный, модульный);

- уравнение-ориентированный (параллельный).

В случае использования уравнение-ориентированного метода, из схемы процесса генерируется общая система уравнений, которая в последствии решается как одно целое, как это показано на Рисунке 1. Данный подход может применяться при моделировании моделей открытой формы [4] и может иметь более высокую скорость сходимости по сравнению с блочно-ориентированным методом.

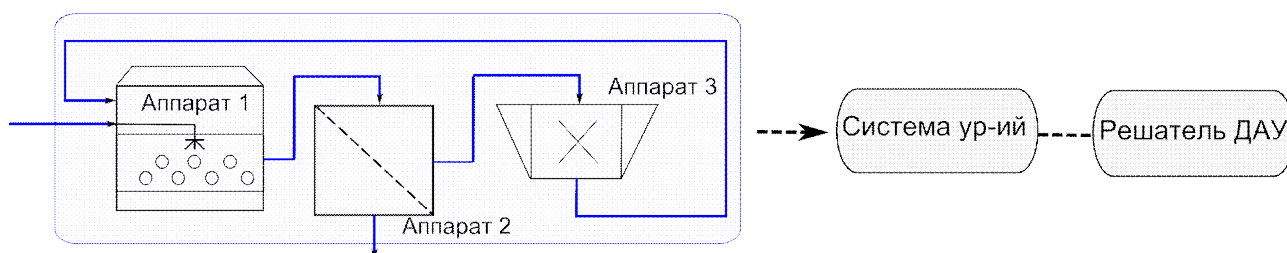


Рисунок 1.-Общая схема моделирования (уравнения-ориентированный метод).

При использовании блочно-ориентированного метода [5], [6] каждая модель вычисляется независимо с использованием отдельного решателя, как это показано на рисунке 2.

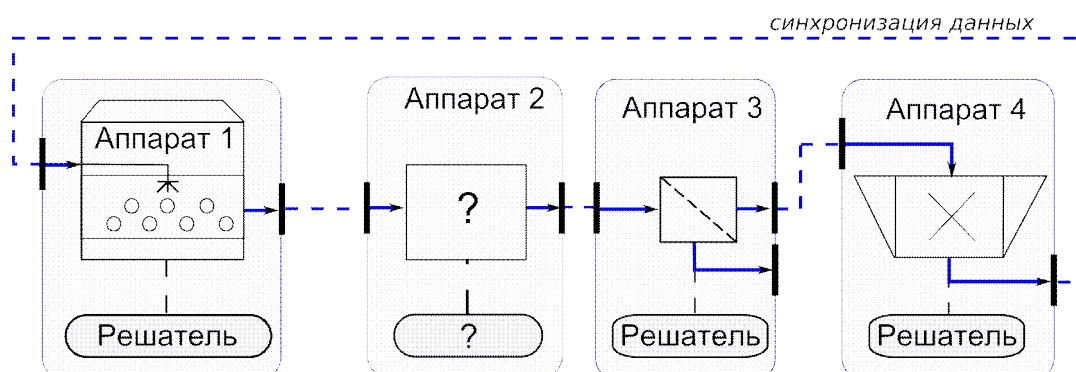


Рисунок 2 - Общая схема моделирования (блочно-ориентированный метод).

Использование блочного метода имеет ряд преимуществ:

- обладает более высокой степенью свободы при составлении схемы процесса. Независимо от структуры модели она может быть добавлена на схему;
- только этот способ может быть использован, в случае отсутствия решателя дифференциальных уравнений, способного вычислить всю схему. Подобная ситуация возникает достаточно часто, так как многие модели описываются с помощью популяционных балансов и сложных интегро-дифференциальных уравнений;

- ведет к более простой процедуре нахождения состоятельных начальных значений [7];

- позволяет параллелизировать вычисления [8]. В этом случае схема разбивается на участки, которые могут быть вычислены параллельно на многопроцессорной системе.

Один из возможных способов реализации блочно-ориентированного метода – использование метода волновой релаксации (ВР) [9]. Основная идея метода заключается в том, что система дифференциально-алгебраических уравнений (ДАУ) разбивается на подсистемы, каждая из которых вычисляется независимо на определенном временном интервале. После чего происходит обмен данными между подсистемами и анализируется сходимость решения. Если решение сошлось, то вычисления могут быть продолжены на новом временном интервале. В противном случае необходимо провести повторные вычисления на предыдущем интервале.

Одним из основных преимуществ метода ВР является то, что различные решатели с различными внутренними шагами вычисления могут использоваться одновременно. В случае гетерогенных процессов, когда существует модели с быстрыми и медленными переходными процессами, применение подобного метода может значительно уменьшить объем необходимых вычислений. С другой стороны сильная взаимосвязь между моделями может замедлить скорость сходимости [10].

3. Алгоритм моделирования

На Рис. 3 изображена блок-схема основного алгоритма вычислений в системе SolidSim-Dynamics.

На первом этапе выполняется процедура вычисления начальных значений. Это итерационный процесс, который повторяется до достижения сходимости. В качестве критерия сходимости используется разность между значениями на предыдущей и текущей итерациями. Пусть *RelTol* и *AbsTol* относительная и абсолютная погрешность соответственно, тогда сходимость будет анализироваться на основе следующего уравнения:

$$\|Y_j^{i+1} - Y_j^i\| < \max\{ |Y_j^{i+1}| \cdot RelTol + AbsTol, |Y_j^i| \cdot RelTol + AbsTol \}, \forall j \in [1..N] \quad \text{Ур. (1)}$$

где Y_j^i вектор выходных значение модуля j на итерации i и N – общее число моделей.

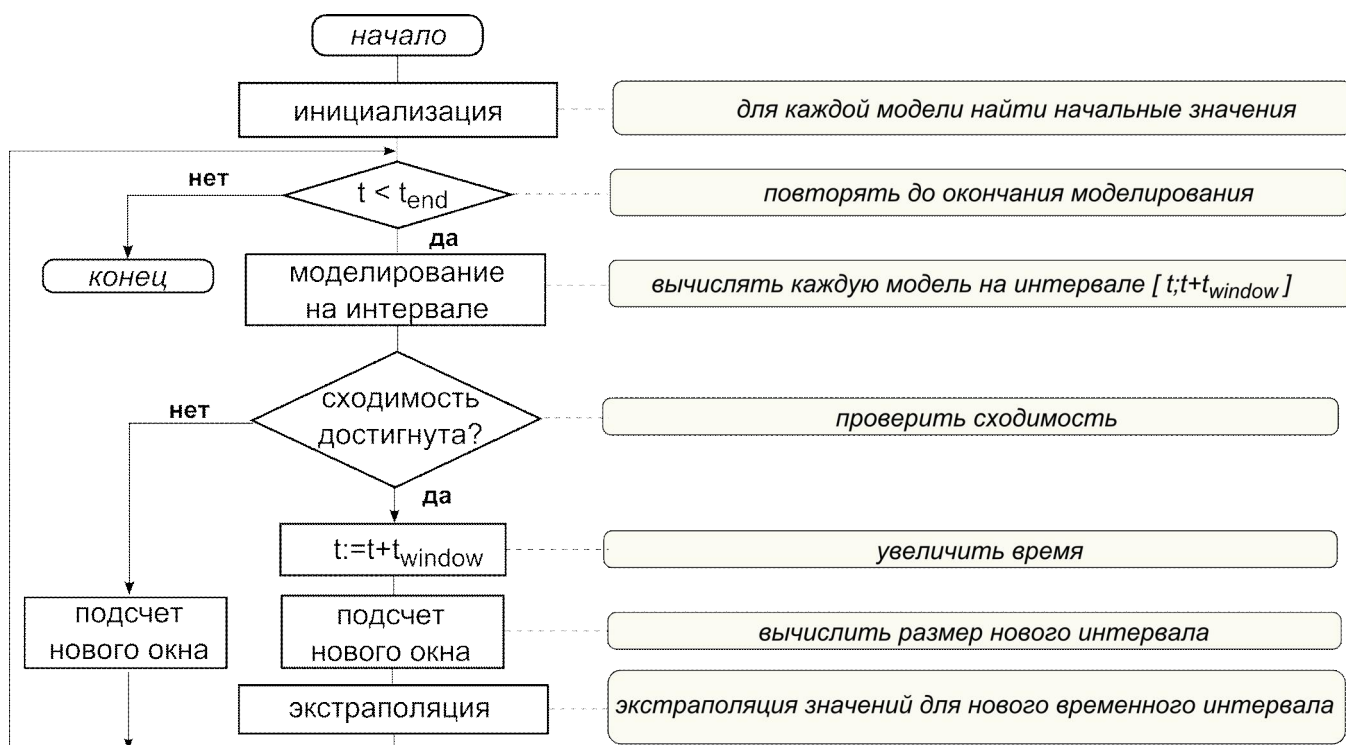


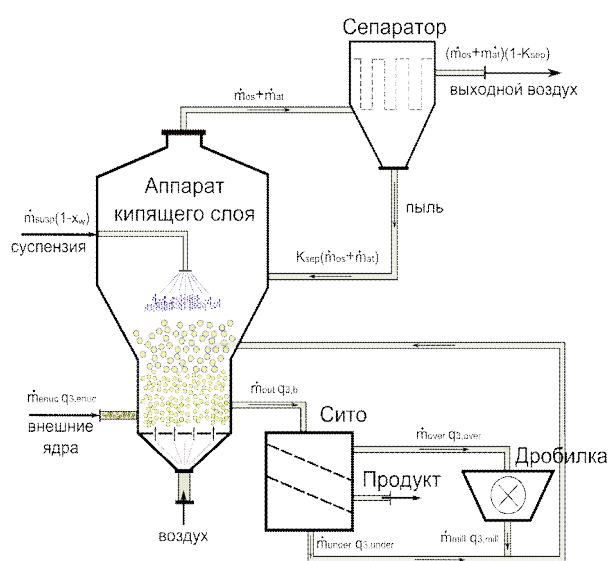
Рисунок 3 - Блок-схема алгоритма вычисления

В основном цикле алгоритма каждая модель вычисляется независимо от других на интервале $[T, T + T_{window}]$. После этого выполняется анализ сходимости.

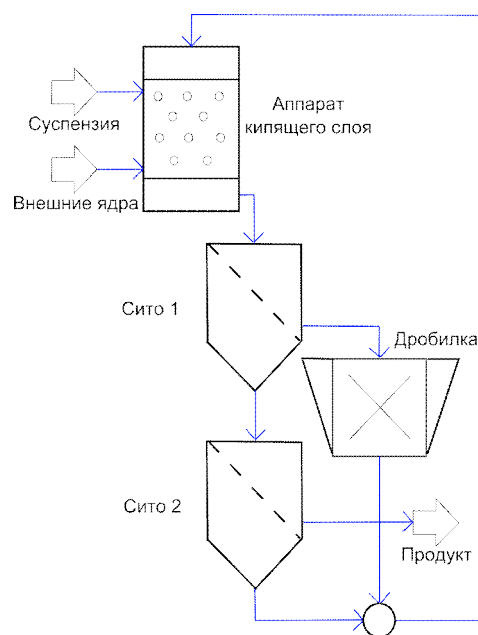
Численное решение систем дифференциальных алгебраических уравнений в SolidSim-Dynamics осуществляется в неявной форме $G(t, Y, Y') = 0$ с помощью BDF метода с порядками от 1 до 5 [11].

4. Моделирование процессов грануляции

Для тестового моделирования в системе SolidSim-Dynamics был использован процесс грануляции в аппарате кипящего слоя. Общая схема процесса и его представление в системе моделирования показаны на Рис. 4 [12].



(Исходная схема)



(Схема в SolidSim-Dynamics)

Рисунок 4 - Схема процесса грануляции и его представление в системе SolidSim-Dynamics

Для описания процесса грануляции используется одномерная модель популяционного баланса (ПБ), где в качестве пространственной координаты был использован диаметр частиц. Основное дифференциальное уравнение в частных производных для описания изменения распределения частиц имеет следующую форму:

$$\frac{\partial n_{tot} q_{0,b}}{\partial t} = - \frac{\partial G_e n_{tot} q_{0,b}}{\partial d_p} + \dot{n}_{in} q_{0,in} - \dot{n}_{out} q_{0,out} \quad \text{Ур. (2)}$$

где $\frac{\partial n_{tot} q_{0,b}}{\partial t}$ временное изменение количества частиц,

$-\frac{\partial G_e n_{tot} q_{0,b}}{\partial d_p}$ описывает рост и истирание частиц,

$\dot{n}_{in} q_{0,in} - \dot{n}_{out} q_{0,out}$ входной и выходной потоки частиц.

ПБ в Ур. 2 может быть переформулирован в форму массового распределения:

$$n_{tot} q_{0,b}[i] = \frac{6}{\pi \cdot \rho \cdot d_i^3} M_{tot} \cdot q_{3,b}[i] \quad \text{Ур. (3)}$$

После дискретизации Ур. 3 процесс грануляции может быть представлен как система обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\frac{dM_{tot}q_{3,b}[i]}{dt} = -G_e \frac{M_{tot}q_{3,b}[i] - \left(\frac{d_p[i]}{d_p[i-1]}\right)^3 M_{tot}q_{3,b}[i-1]}{\Delta d} + (\dot{M}_{in} \cdot q_{3,in}[i] - \dot{M}_{out} \cdot q_{3,out}[i])$$

Ур. (4)

где $\dot{M}_{in}$, $\dot{M}_{out}$ входной и выходной массовые потоки соответственно;

Δd размер класса;

$d_p[i]$ диаметр частиц в классе i ;

G_e скорость роста.

Скорость роста G_e и общая поверхность частиц A_{tot} вычисляются по формулам:

$$G_E = \frac{2\dot{M}_e}{\rho_{solid} \cdot A_{tot}}$$

Ур. (5)

$$A_{tot} = \int_0^\infty \frac{6M_{tot} \cdot q_{3,b} \cdot dd_p}{\rho_{solid} \cdot d_p}$$

Ур. (6)

$$d_{32} = \frac{6 \cdot M_{tot}}{\rho_{solid} \cdot A_{tot}}$$

Ур. (7)

где $\dot{M}_e$ эффективный массовый поток и ρ_{solid} плотность частиц.

Основной задачей тестового моделирования была проверка работоспособности программы и правильности полученных результатов. Для этого результаты моделирования были сравнены с ранее полученными результатами [13, 14].

Предыдущие экспериментальные результаты и результаты численного моделирования показали, что свойства дробилки имеют значительное влияние на процесс. В случае мелкого измельчения процесс может иметь нестационарное состояние. На Рис. 5 и Рис. 6 показано изменение диаметра Заутера распределения частиц в случае крупного и мелкого измельчения. Для сравнения результатов на рисунках также отображены результаты полученные в среде Matlab.

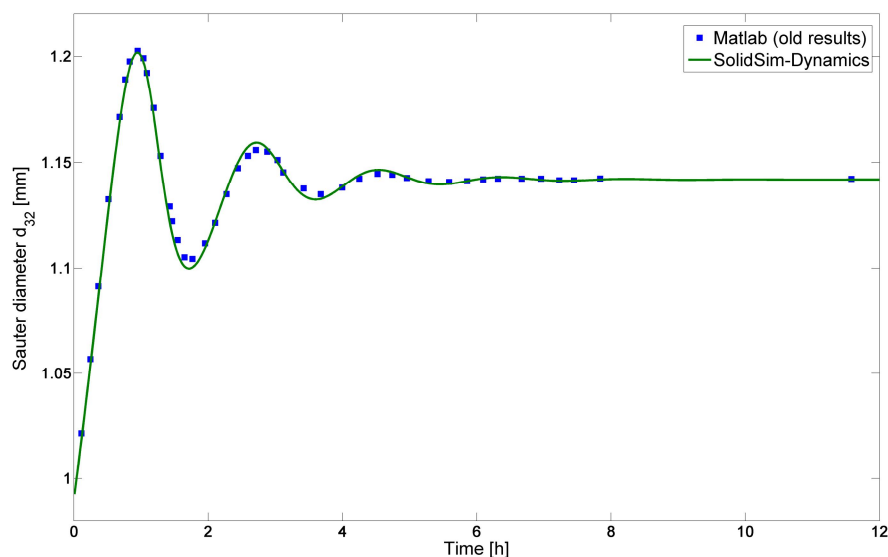


Рисунок 5 - Сравнение результатов моделирования в системах SolidSim-Dynamics и Matlab в случае крупного измельчения

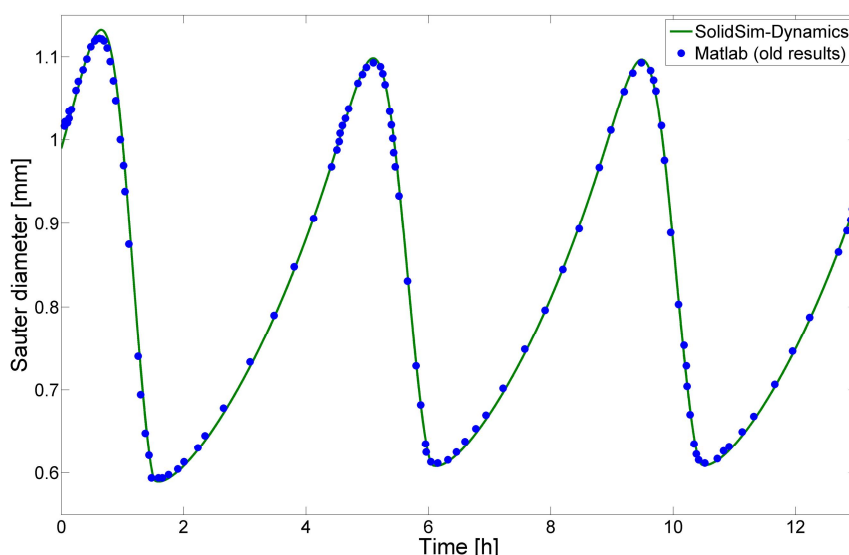


Рисунок 6 Сравнение результатов моделирования в системах SolidSim-Dynamics и Matlab в случае мелкого измельчения

6. Выводы. В данной работе представлены методы моделирования технологических процессов твердофазных материалов. В качестве основного метода моделирования были использованы блочно-ориентированный подход и метод волновой релаксации. Работоспособность системы и правильность вычисляемых значений были проверены на примере моделирования процесса грануляции в аппарате кипящего слоя.

Разработанная система SolidSim-Dynamics включает несколько аспектов:

- параллельное использование динамических и стационарных моделей для описания технологического процесса;
- моделирование нестационарных процессов;
- реализованные методы моделирования позволяют эффективно осуществлять параллелизацию системы;
- возможность расширять библиотеку динамических моделей;
- для вычисления процесса могут быть одновременно применяться несколько решателей.

Список литературы

1. Hartge E.U., Pogodda M., Reimers C., Schwier D., Gruhn G. and Werther J, 2006. Flowsheet Simulation of Solids Processes. KONA No.24, pp. 146-156.
2. Jarke M., Köller J., Marquardt W., vonWedel L., and Braunschweig B, 1999. CAPE-OPEN: Experiences from a standardization effort in chemical industries. Technical report, Lehrstuhl für Prozesstechnik, RWTH Aachen, 1999.
3. Marquardt W., 1991. Dynamic Process Simulation - Recent Progress and Future Challenges, Chemical Process Control CPC-IV. CACHE Publications, Austin, TX, pp 131-180.
4. Shopfer G., Yang A., vonWedel L., Marquardt W., 2004. CHEOPS: A tool-integration platform for chemical process modelling and simulation. International Journal of Software Tools Technology Transfer No. 6, pp. 168-202.
5. Helget A., 1997. Modulare Simulation verfahrenstechnischer Anlagen. Fortschr.-Ber. Dusseldorf: VDI Verlag, 132 p.
6. Hillestad M., Hertzberg T., 1986. Dynamic Simulations of Chemical Engineering Systems by the Sequential Modular Approach. Computers and Chemical Engineering, Vol. 10, No. 4, pp. 377-388.
7. Biegler L.T., Grossmann I.E., Westerberg A.W., 1997. Systematic methods of chemical process design. Prentice HALL PTR, New Jersey, p. 796.
8. Borchardt J., Klaus E., Grund F., Horn D., 1999. Parallel Modular Dynamic Process Simulation. Scientific Computing in Chemical Engineering II, vol. 2, Springer- Verlag Berlin Heidelberg New York, 1999, pp. 152-159.
9. Lelarsmee E., 1982. The Waveform Relaxation Method for Time Domain Analysis of Large Scale Integrated Circuits: Theory and Applications. PhD Thesis, EECS Department University of California, Berkeley, 1982.
10. Dosta M., Mangold M., Kienle A., Svjantjy V., 2008. Parallel Simulation of a Molten Carbonate Fuel Cell System, ESCAPE 18.
11. Ascher U.M., Petzold L.R. 1998. Computer methods for Ordinary Differential and Differential Algebraic Equations. Society for Industrial and Applied Mathematics, 314 pp.
12. Heinrich S., Peglow M., Ihlow M., Mörl L., 2003. Particle population modeling in fluidized bed-spray granulation - analysis of the steady state and unsteady behaviour, Powder Technology 130, pp. 154-161.
13. Radichkov R., Müller T., Kienle A., Heinrich S., Peglow M., Mörl L., 2006. A numerical bifurcation analysis of continuous fluidized bed spray granulation with external product classification, Chemical Engineering and Processing 45, pp. 826-837.
14. Heinrich S., 2001. Modellierung des Wärme- und Stoffübergangs sowie der Partikelpopulationen bei der Wirbelschicht Sprühgranulation, VDI Verlag, 254 p.