Construirea modelelor matematice pentru analiza bilanțurilor de materiale şi energii

Prep. drd. Alexandra Fortiş
USAMVB Timişoara

ABSTRACT. Some of the most important elements for description and interpretation of engineering problems are materials and energy balance. In this paper we will present the basic skills for constructing materials and energy balances, using as a starting point the conservation laws of physics. There will be pointed out the main aspects of this kind of mathematical models.

1 Introducere

Studiul analitic al unui sistem se efectuează pe un model matematic al acestuia. Modelul matematic este un ansamblu de ecuații în care variabilele cunoscute sunt mărimile de intrare iar cele necunoscute sunt mărimi de ieşire. Procesele sunt sisteme pentru care obținerea modelelor matematice este destul de dificilă.

În general, modelele pentru procese industriale sunt bazate pe ecuații de conservare, de regulă concretizate prin ecuații de bilanț de materiale sau de energii. Acestora li se ataşează o serie ecuații complementare, cum ar fi ecuațiile de stare, sau de echilibru, ecuații pentru calculul anumitor coeficienți ce apar în ecuațiile de bilanț sau ecuații care redau dependența proprietăților fizico-chimice ale sistemului.

Cu alte cuvinte, atunci când se vorbeşte despre modelarea bilanțurilor de materiale, ne referim, de fapt, la întregul proces economic sau productiv caracterizat prin bilanțurile respective.

2 Adaptarea legilor de conservare

Modelul matematic al unui proces în care se desfăşoară o serie de fenomene fizico-chimice se obține prin folosirea legilor generale de conservare. Printre mărimile care se conservă în astfel de procese se numără masa şi energia.

Conceptele de bilanțuri de materiale şi energii sunt utilizate în cazul unor sisteme închise şi izolate, caz în care intrările sunt egale cu ieşirile, pentru sisteme în care există acumulări sau pentru sisteme în care există consum şi producere şi care sunt dependente de timp.

Prin scrierea bilanțurilor de materiale şi energii pentru un sistem dat se obține modelul matematic al acestuia. În cadrul modelului apar trei categorii de variabile:

- mărimi de intrare care sunt funcții de timp cunoscute
- mărimi de ieşire, necunoscutele modelului care pot fi calculate prin "rezolvarea" modelului. De cele mai mult ori, acestea nu sunt mărimile fundamentale pentru care se face bilanțul, ci unele derivate din acestea, mai uşor de măsurat. Astfel, în locul energiei apare, de regulă, temperatura iar în locul masei totale poate să intervină nivelul.
- parametri şi constante, mărimi cunoscute pentru fiecare proces în parte.

Conservarea unei mărimi fundamentale se exprimă prin ecuația de bilanț a mărimii respective, ecuație care are forma generală

$$\frac{Acumulari\ \text{în}\ sistem}{unitate\ de\ timp} = \frac{Intrari\ \text{în}\ sistem}{unitate\ de\ timp} - \frac{Iesiri\ din\ sistem}{unitate\ de\ timp} + \\ + \frac{produse\ \text{în}\ sistem}{unitate\ de\ timp} - \frac{Consum\ \text{în}\ sistem}{unitate\ de\ timp}$$

Ecuația generală de bilanț este redată, de obicei, sub o formă simplificată

$$Ac = I - E + G - C$$

unde Ac reprezintă acumulările, I intrările, G ceea ce se generează în sistem în timpul procesului iar C este consumul.

Ecuațiile de bilanț capătă următoarele forme posibile, pentru diferitele mărimi care se conservă:

- bilanț al masei totale: $\frac{d(\rho \cdot V)}{dt} = \sum_{i-iesiri} \rho_i \cdot F_i + \sum_{j-iesiri} \rho_j \cdot F_j$
- bilanț al masei de component A:

$$\frac{d(C_A \cdot V)}{dt} = \sum_{i-iesiri} C_{A_i} \cdot F_i + \sum_{j-iesiri} C_{A_j} \cdot F_j + r \cdot V$$

- bilanţ al energiei totale:

$$\frac{d(U+E_c+E_p)}{dt} = \sum_{i-iesiri} \rho_i \cdot F_i \cdot h_i + \sum_{j-iesiri} \rho_j \cdot F_j \cdot h_j \pm Q \pm W$$

ρ - densitatea materialului din sistem

ρ_i (ρ_j) - densitatea materialului din fluxul de intrare i (respectiv de ieşire j)

V - volumul total al sistemului

F_i (F_j) - debitul volumetric al fluxului de intrare (respectiv iesire)

C_A - concentraţia molară a compusului A în sistem

C_{Ai}, C_{Aj} - concentraţia molară a compusului în fluxul de intrare i (respectiv fluxul de ieşire j)

r - viteza de reacţie pe unitatea de volum a compusului A în sistem

h_i (h_j) - entalpia specifică a materialului în fluxul de intrare i (respectiv cel de ieşire j)

U - energia internă (entalpia) sistemului

E_c - energia cinetică a sistemului

E_p - energia potenţială a sistemului

Q - debitul de căldură schimbată între sistem şi mediu

W - lucrul mecanic schimbat între sistem şi mediu.

Pe baza ecuaţiilor prezentate mai sus, se obţin modele matematice sub formă de sisteme de ecuaţii diferenţiale, cu timpul ca variabilă independentă, datorită termenului care reprezintă acumulările. Rezolvând aceste sisteme pentru valori date ale parametrilor şi pentru funcţii de timp date ca mărimi de intrare, se obţin mărimile de ieşire ca funcţii de timp, cu alte cuvinte, evoluţia sistemului. În regiuni staţionare, termenul care reprezintă acumulările este nul iar modelul rezultă sub formă algebrică. În acest caz intrările şi ieşirile sunt constante iar acest model este caracteristica statică a sistemului.

3 Instrucţiuni de rezolvare a problemelor de bilanţ

Bilanţurile de materiale se definesc pentru un proces tehnologic sau pentru o unitate a acestuia şi reprezintă aplicarea principiului conservării masei substanţelor (materiilor) la respectivul proces. Conform acestui principiu suma maselor materialelor intrate într-un sistem, într-un anumit interval de timp şi a celor existente la momentul iniţial trebuie să fie egală cu suma maselor materialelor ieşite în acelaşi interval de timp şi a celor rămase în sistem la sfârşitul intervalului de timp considerat.

Modelarea bilanţurilor de materiale prezintă o importanţă majoră în proiectarea unor utilaje moderne, deşi, în practică, acestea sunt în general asociate cu bilaţuri de energii sau de impulsuri.

Stabilirea bilanţurilor termice este o particularizare a principiului conservării energiei la un proces fizico-chimic, pentru cazul în care variaţia tuturor formelor de energie, cu excepţia celei calorice, este nulă. Realizarea acestui tip de bilanţuri permite efectuarea unor calcule relativ la puterile termice care trebuie furnizate unei instalaţii sau care trebuie evacuate dintr-o instalaţie, precum şi determinarea pierderilor termice.

Pentru tratarea şi, implicit, rezolvarea corectă a bilanţurilor trebuie să se urmeze câteva etape:

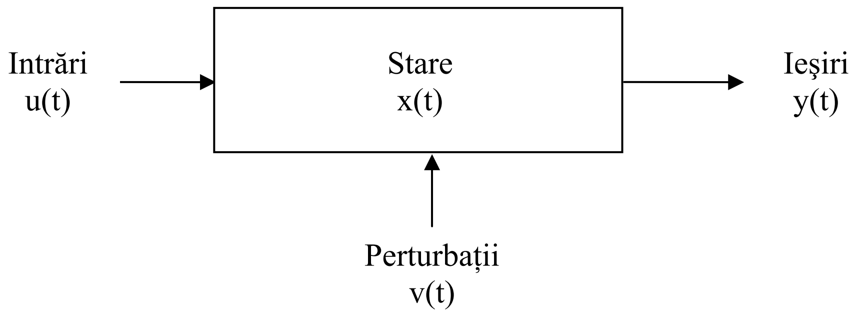
- stabilirea unui domeniu definitoriu pentru limitele procesului
- trasarea unei diagrame/scheme a procesului
- figurarea tuturor datelor cunoscute pe această diagramă
- desemnarea necunoscutelor prin simboluri specifice
- selectarea unei baze pentru efectuarea calculelor (intervale de timp, cantităţi de materie sau de energie)
- scrierea tuturor reacţiilor care se desfăşoară în proces şi a bilanţurilor corespunzătoare
- deducerea din aceste ecuaţii a variabilelor necunoscute
- reconstituirea bilanţurilor pentru verificare
- redarea rezultatelor într-o formă sistematizată, în cazul în care bilanţurile sunt verificate.

Cea mai importantă idee care este utilizată este, prin urmare, aceea de conservare. O cantitate care este conservată nu poate fi schimbată de un proces. Acest lucru este echivalent cu faptul că nu este necesară cunoaşterea tuturor detaliilor procesului pentru a înţelege consecinţele acestuia.

4 Modele de bilanţuri pentru diferite tipuri de sisteme

Într-o reprezentare grafică simplificată, un sistem liniar cu o intrare şi o ieşire are forma din figura următoare.

Sistemele liniare de primul ordin, cu o intrare şi o ieşire sunt acele sisteme în care intrarea şi ieşirea sunt legate printr-o ecuaţie diferenţială liniară de primul ordin, cu coeficienţi constanţi. Un exemplu pentru acest caz ar putea fi un termometru pentru care bilanţul termic reprezintă variaţia energiei termice.



Ecuaţia de bilanţ are forma

$$m \cdot C_p \frac{dT}{dt} = h \cdot A \cdot (T_0 - T)$$

C_p - este capacitatea calorică a termometrului
A - suprafaţa de contact dintre termometru şi mediu
h - coeficientul de transfer termic
T_0 - temperatura mediului
T - temperatura înregistrată

Un alt caz ar fi analiza nivelului lichidului dintr-un rezervor. Aici este vorba despre un bilanţ volumic: variaţia volumului în unitatea de timp este înregistrată ca diferenţă a debitelor de intrare Q_I şi de ieşire Q_O. Ecuaţia de bilanţ poate lua două forme:

$$\Omega \frac{dy}{dt} = Q_I - Q_O \quad sau \quad R\Omega \frac{dy}{dt} + y = RQ_I$$

unde Ω este secţiunea rezervorului iar R este o caracteristica a vanelor.

Forma comună a acestor două probleme ar putea avea forma

$$\tau \cdot \frac{dy}{dt} + y = Ku$$

cu τ reprezentând inerţia sistemului iar K un indicator pentru analiza eficienţei sistemului.

Un alt tip de probleme pentru care se pot calcula bilanţuri este cel al sistemelor liniare de ordinul doi cu o intrare şi o ieşire care sunt legate printr-o relaţie diferenţială de ordinal doi, liniară şi cu coeficienţi constanţi.

Pentru exemplificare se poate utiliza un sistem alcătuit din două mixere montate în cascadă, pentru care există două bilanţuri molare (câte unul pentru fiecare utilaj)

$$\frac{V_1 \cdot V_2}{F^2} \cdot \frac{d^2 C_0^2}{dt^2} + \left(\frac{V_1}{F} + \frac{V_2}{F} \right) \cdot \frac{dC_0}{dt} + C_i = C_i$$

unde V_1, V_2 reprezintă volumele celor două dispozitive, C_o este ieşirea din sistem, C_i este intrarea în sistem iar F este debitul volumic de alimentare.

Forma canonică generală pentru astfel de probleme este

$$\tau^2 \frac{d^2 y}{dt^2} + 2\xi\tau \frac{dy}{dt} + y = Ku$$

cu K reprezentând beneficiul sistemului, τ constanta de timp iar ξ un coeficient de amortizare.

Ultimul tip general de bilanţuri pe care îl prezentăm aici poate fi aplicat sistemelor liniare multivariabilă, pentru exemplificarea cărora se poate reveni la exemplul anterior al mixerelor în cascadă. Bilanţurile acestui sistem pot fi prezentate într-o scriere matricială, folosind două constante de timp, câte una pentru fiecare din cele două mixere

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} C_1 \\ C_O \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\tau_1} & 0 \\ \frac{1}{\tau_2} & -\frac{1}{\tau_2} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} C_1 \\ C_O \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{1}{\tau_1} \\ 0 \end{pmatrix} \cdot C_I$$

cu C_1 starea intermediară a produselor între starea de intrare şi cea de ieşire. Restrânsă, această formulă se poate rescrie

$$\frac{dx}{dt} = Ax + Bu, y = Cx$$

unde x reprezintă starea sistemului, A este matricea dinamică, B matricea de comandă iar C o matrice de observaţie.

5 Concluzii

Prin această lucrare este realizată o introducere în tematica construirii modelelor matematice pentru problemele industriale rezolvabile prin intermediul bilanţurilor de materiale sau de energie, la nivelul adaptării relaţiilor din fizică relativ la conservarea diferitelor mărimi. În lucrări viitoare vom formula modele matematice pentru cazuri concrete legate de procese din industrie, abordând atât partea de modelare matematică cât şi partea de optimizare.

Bibliografie

[Rin99] **I. Rinard,** *Material balance notes*, Project ECSEL, 1999

[WMI90] **A. Woinaroschy, M. Mihai, R. Isopescu**, *Optimizarea proceselor din industria chimică*, Ed. Tehnică, Bucureşti, 1990

[WS83] **A. Woinaroschy, O. Smigelschi**, *Ingineria sistemelor şi optimizarea proceselor chimice*, E. D. P., Bucureşti, 1983