

Стратегия системного подхода в энергосбережении – это принципы достижения конечной цели исследований и разработок – создания высокоэффективных энергосберегающих физико-технологических систем. Данная стратегия отражена в разрабатываемом нами топологоэксергетическом методе анализа физико-технологических систем (ФТС), который объединяет достоинства эксергетического и топологического (диаграмм связи) методов [6-14].

Специфика объектов в металлургии, химической технологии, теплотехнике, представляемых как ФТС, оказывает существенное влияние на рабочий математический аппарат топологоэксергетических структур связи и требует постоянного его развития. Это позволяет решать теоретические вопросы, касающиеся применения традиционных и нетрадиционных энергоносителей (химическая энергия кислот, щелочей, сульфидов, фтора, хлора, металлов и др.) в технологических процессах и выполнять анализ их эксергетического совершенства.

### Постановка задачи

Формализм топологоэксергетического метода предполагает создание системы структур, обеспечивающих получение исчерпывающих характеристик энергопотребления конкретных ФТС в виде математического описания. В рамках решения этой задачи в указанных работах [6-13]:

- 1) разработана аксиоматика топологоэксергетических структур связей ФТС;
- 2) сформулирован топологоэксергетический подход к моделированию ФТС;
- 3) создан основной алгоритм формирования математической модели ФТС с использованием ТСС (топологических структур связи).

Цель данной работы - создание формализованных структур формирования математических моделей ФТС с учетом химических процессов, отражающих эксергетическую сторону их функционирования, при дальнейшем совершенствовании топологоэксергетического метода, используемого для решения задач энергосбережения.

При этом в работе предполагается:

- 1) выполнить на основании теоретико-множественного подхода эксерготермодинамический анализ ФТС, осложненных химическими реакциями;
- 2) сформулировать энергетические аспекты топологоэксергетического метода описания ФТС;
- 3) выявить эксерготермодинамические особенности химических реакций и разработать их типовые ТСС.

### Методика исследований

#### 1. Эксерготермодинамический анализ ФТС, осложненных химическими реакциями

##### 1.1 Теоретико-множественный подход

Методы теорий сетей и управления, используемые для описания сложных динамических систем, показали, что электрическую сеть можно рассматривать как необратимую термодинамическую систему [3-8, 17-20]. В этой работе обобщаются методы теорий сетей таким образом, что появляется возможность учитывать эксергию сложных явлений в ФТС осложненных химически-

ми реакциями. Используется топологоэксергетический принцип формализации, поскольку при этом все эксергетические процессы рассматриваются с единой позиции, и есть возможность наглядно представить структуры связи сложных систем с преобразованиями эксергии.

Процессы в ФТС, осложненные химическими реакциями, на языке теорий сетей рассматриваются как эксерготермодинамические в системе представляющей  $n$ -канальный элемент, состояние которого задано конечным числом внешних параметров, т.е. конечным числом связей с внешней средой. Каждой такой связи соответствует пара сопряженных переменных: переменная типа потока  $f_i$  и переменная типа эксергетического усилия  $e_i^3$ . Выбор по крайней мере одного множества  $x=(f_1, \dots, f_k; e_{k+1}^3, \dots, e_n^3)$  из  $n$  этих величин достаточен для определения сопряженного множества  $y=(e_1^3, \dots, e_k^3; f_{k+1}, \dots, f_n)$ . Отображение  $f \rightarrow e^3$  называется определяющим соотношением  $n$ -канального элемента. Обсуждению вопроса о соединении систем из  $n$ -канальных элементов предшествует этап наложения ограничений на переменные  $(f_i, e_i^3)$  в узлах связей:

1) допускается соединение связей только одинаковой эксергетической природы;

2) на переменные типа обобщенного потока  $f_i$  накладываются ограничения в виде уравнения сохранения (закон Кирхгофа для потоков);

3) на переменные типа обобщенного эксергетического усилия  $e_i^3$  накладываются ограничения в виде уравнения непрерывности (закон Кирхгофа для эксергетических усилий).

При этом функция, устанавливающая соответствие независимым переменным канала зависимые переменные канала, называется конститутивной зависимостью или уравнением состояния  $n$ -канальной структуры. Формально мы будем определять  $n$ -канальную структуру через ее конститутивную зависимость.

**Определение:**  $n$ -канальная структура является отображением функции  $F$ , которое устанавливает для ряда  $n$  независимых переменных канала, ряд  $n$  сопряженных переменных:

$$F : R^n \rightarrow R^n, X \rightarrow Y(x),$$

где  $R^n$  является простым Евклидовым  $n$ -мерным пространством с обычной структурой вектора состояния;  $X$  и  $Y$  векторы переменных канала, например,

$$(\dot{S}, \dot{V}, \dot{n}_1, J_i, \dot{m}_1) \rightarrow (T, -P, \mu_i, A_i, e_i^3).$$

Будем предполагать, что функция  $F$  достаточно дифференцируемая. Например, простая стенка аппарата характеризуется кондуктивной эксергетической емкостью по теплу, являясь одноканальной структурой, конститутивная зависимость которой следующая:  $Q \rightarrow \eta_k(Q)$ , где  $Q$  – количество теплоты (заряд), накопленный стенкой как эксергетической емкостью; а  $\eta_k$  – фактор Карно, характеризующий эксергетическое усилие.

Кроме того, рассмотрим пример, где в качестве одноканальной эксергетической емкости структуры рассматривается химическая емкость, конститутивная зависимость которой следующая:

$$m_k \rightarrow e_{xi}^3 (m_i),$$

где  $m_i$  - масса (количество молей) компонент  $i$ , т.е. заряд накопленной в химической емкости;  $e_{xi}^3$  - удельная химическая эксергия  $i$ -го компонента химической емкости.

Существует важное различие между классической термодинамикой и теорией цепей, касающееся роли переменных канала и конститутивных зависимостей. Это различие отражено в разных методиках, используемых для расчета равновесия или стационарных состояний. Классический подход к равновесной термодинамике кратко обобщен в работах [17-19]. При этом строится «пространство состояний», координатами которого являются соответствующие термодинамические «перемещения» для рассматриваемых систем. «Перемещениями» являются согласно Гиббсу «экстенсивные» свойства - энтропия ( $S$ ), объем ( $V$ ), количество молей  $i$ -го компонента ( $n_i$ ), масса  $j$ -го компонента ( $m_j$ ) и т.д. Представляя все «перемещения» вектором  $x = (S, V, n_i, m_j)^T$ , мы можем определить реально значимую функцию в пространстве состояний

$$U : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n :$$

$$U = U(S, V, n_1, \dots, n_k, m_1, \dots, m_p) \quad (1)$$

В настоящее время постулировано, что равновесные свойства ФТС полностью задаются функцией  $U$  [17-19].

Например, мы можем определить потенциалы сопряженные «перемещениям» как компоненты  $DU(x)$  градиента  $U$  обозначим  $D$  дифференциальный оператор (Якобиан) по Флемингу [17-19]

$$\begin{aligned} Y(x) \approx DU(x) &\approx \left( \frac{\partial U}{\partial S}, \frac{\partial U}{\partial V}, \frac{\partial U}{\partial n_1}, \dots, \frac{\partial U}{\partial n_k}, \frac{\partial U}{\partial m_1}, \dots, \frac{\partial U}{\partial m_p} \right) \approx \\ &\approx (T, -P, \mu_1, \dots, \mu_k, e_1^3, \dots, e_m^3) \end{aligned} \quad (2)$$

Матрица частных производных второго порядка  $U$ , т.е. матрица Гесса (Hessian), является тривиально симметричной исходя из равенства смешанных частных производных

$$D^2U(x) = D^2(x)^T, \quad (3)$$

при этом получают знакомые эквивалентные отношения Максвелла [17-19]. Эквивалентность предполагает, что входные и выходные каналы ФТС взаимозаменяемы без влияния на систему «малого сигнала».

Известно, что равновесная термодинамическая  $n$ -многоканальная структура определяется путем минимизации  $U$  (или соответствующего преобразования Лежандра), подчиняющейся соответствующим граничным условиям (например,  $T=\text{const}$ ,  $V=\text{const}$ ) [17-19].

В методе Бренстеда [17-19] берутся в качестве простых величин экспериментально измеряемые переменные  $x$  и  $y$ , которые гораздо предпочтительнее, чем внутренняя энергия  $U$ . Без использования потенциальной функции, равновесное состояние не может быть охарактеризовано по принципу экстремума, но должно быть легко рассчитано из конститутивного соотноше-

ния и граничных условий. Эквивалентность по Максвеллу не является автоматическим следствием дифференцируемой потенциальной функции, поэтому она рассматривается как экспериментальное свойство, являющееся дополнительным ограничением конститутивной зависимости  $F$ . Эквивалентность - это цена за любые формы равновесных систем, хотя часто сталкиваются с неравновесными процессами, которые не являются эквивалентными (например, тепловые процессы, химические реакции и т.д.) и конститутивная зависимость которых не может быть охарактеризована потенциальной функцией.

Описание  $n$ -канальной структуры, конечно, упрощено, когда имеет место эквивалентность.

Для тех случаев, когда Якобиан  $F$  симметричен,  $F$  можно выразить как градиент векторного поля  $\mathbb{R}^n$ . Все канальные конститутивные зависимости обобщаются однозначной потенциальной функцией и могут быть вновь восстановлены из компонентов  $DU(x)$  по уравнению (3). Для однородных систем обычно постулируется другая конститутивная зависимость в дополнение к эквивалентности - гомогенность. Поэтому, задавшись эквивалентной конститутивной зависимостью, полагаем, что массу системы можно увеличить на любую желаемую величину без изменения таких интенсивных переменных как  $(T, P$  и т.д.)

## 1.2 Энергетические аспекты топологическо-эксергетического метода описания ФТС

При рассмотрении произвольной ФТС [12,13] с сосредоточенными параметрами и выборе ассоциированные опорные направления для обобщения эксергетических усилий связей  $e_k^3$  и обобщения потоков связей  $f_k$  определили, что  $e_k^3(t) \cdot f_k(t)$  является эксергетической мощностью, передаваемой ФТС связи  $k$  в момент времени  $t$ . Далее, пренебрегая природой связи, представим ФТС как топологическо-эксергетическую структуру связи, для которой теорема Теллеждена утверждает [12,13], что

$$\sum_{k=1}^b e_k^3 \cdot f_k = 0. \quad (4)$$

Единственное требование, предъявляемое к обобщенным эксергетическим усилиям  $e_k^3$  и потокам  $f_k$  связей, состоит в том, что они должны удовлетворять всем ограничениям, исходящим из 2-го закона Кирхгофа. Природа элементов (т.е. фактически какие элементы будут иметь  $e_i^3$  и  $f_i$ ) абсолютно не имеет значения для справедливости теоремы Теллеждена. Сила теоремы заключается в том, что  $e_i^3$  и  $f_i$  произвольны (с учетом ограничений закона Кирхгофа).

Эта теорема является чрезвычайно общей. Она может быть применена к любой ФТС с сосредоточенными параметрами, содержащей любые элементы, линейные и нелинейные, пассивные или активные, изменяющиеся во времени или постоянные во времени.

Следствие: для топологоэксергетической структуры связи  $\Gamma$ , состоящей из многосвязных элементов и узлов справедливо, что

$$\sum_{\text{элементы}} \mathbf{e}_i^T \mathbf{f}_i = 0, \quad (5)$$

где  $\mathbf{e}_i^T$  - транспонированные векторы обобщенных эксергетических усилий связей (переменные закона Кирхгофа для обобщенных эксергетических усилий – ЗКУ: напряжение, удельная химическая эксергия, давление и т.д.);  $\mathbf{f}_i$ -векторы обобщенных потоков связей (переменные закона Кирхгофа для обобщенных потоков – ЗКП: ток, массовый поток, объемный расход и т.д.)  $i$ -той многосвязной системы одновременно существующие в ФТС.

При этом уравнение (5) отражает то, что в любой момент сумма подаваемых и потребляемых эксергетических мощностей равна нулю.

Приведенные рассуждения справедливы независимо от природы элементов и входных величин анализируемой системы. Если ФТС задана входными переменными, то можем записать следующее уравнение

$$\sum_{\text{вх } i} e_{\text{вх } i}^{\text{э}} \mathbf{f}_i = \sum_{\text{вн } j} e_{\text{вн } j}^{\text{э}} \mathbf{f}_{\text{вн } j}, \quad (6)$$

где обозначение внутренних связей и элементов ФТС используется подстрочное обозначение – вн, а для обозначения входов - вх.

## 2. Эксерготермодинамические особенности химических реакций

Для анализа энергетического совершенства ФТС, осложненных химическими реакциями, необходимо определять значение химической энергии и эксергии любых веществ и соединений. Это выполнимо посредством методики, предложенной В.С. Степановым [16].

Рассмотрим однородную ФТС, в которой протекает единственная реакция при постоянных температуре и давлении. Соответствующим эксерготермодинамическим потенциалом для такой ФТС является свободная эксергия  $G^{\text{э}}$ :

$$dG^{\text{э}} = \sum_{i=1}^N e_i^{\text{х}} dm_i, \quad (7)$$

где  $e_i^{\text{х}}$  - удельная химическая эксергия компонента  $i$  и  $m_i$  - масса (или количество молей) компонента  $i$ .

Условие химико-эксергетического равновесия имеет вид

$$dG^{\text{э}} = \sum_{i=1}^N e_i^{\text{х}} dm_i = 0. \quad (8)$$

При протекании химической реакции происходит необратимое уменьшение свободной эксергии со скоростью

$$\dot{G}^{\text{э}} = \sum_{i=1}^N e_i^{\text{х}} \dot{m}_i. \quad (9)$$

Однако не все  $\dot{m}_i$  независимы. Условие стехиометрии реакции определяет следующее ограничение:

$$\frac{\dot{m}_i}{v_i} = \frac{\dot{m}_j}{v_j} \quad \forall i, j, \quad (10)$$

где стехиометрические коэффициенты реакции  $v$  положительны для продуктов и отрицательны для реагентов. Назовем отношение

$$\frac{\dot{m}_i}{v_i} \approx J^{\text{R}} \quad (11)$$

скоростью реакции и перепишем уравнение (9) в виде

$$\dot{G}^{\text{э}} = J^{\text{R}} \sum_{i=1}^N v_i e_i^{\text{х}}. \quad (12)$$

Назовем по аналогии с Де Донде [18]

$$- \sum_{i=1}^N v_i e_i^{\text{х}} \approx A^{\text{э}}. \quad (13)$$

эксергетическим сродством реакции.

Выражение (9) запишем в виде

$$- \frac{dG^{\text{э}}}{dt} = J^{\text{R}} A^{\text{э}}. \quad (14)$$

Скорость реакции  $J^{\text{R}}$  и эксергетическое сродство  $A^{\text{э}}$  являются соответственно переменными типа обобщенного потока и типа обобщенного эксергетического усилия.

Условие равновесия (8) принимает вид

$$- A^{\text{э}} = \sum_{i=1}^N v_i e_i^{\text{х}} = 0. \quad (15)$$

## 3. Топологоэксергетические структуры связей химических реакций как ФТС

### 3.1 Типовые топологоэксергетические структуры связей химических реакций

Определим топологоэксергетические структуры связей, содержащие всю указанную выше эксерготермодинамическую информацию. В применении к ФТС [3,8] обычно используют три основных типа эксерготермодинамических связей: а) связь при реакции (рис. 1, а); б) непосредственная диффузионная связь (рис. 1, б); в) электромеханическая связь между диффундирующими ионами (рис. 1, в).

Первый тип связи возникает при локальных взаимных превращениях компонентов в ходе химической реакции. Второй тип связи (диффузионный) обычно

рассматривают как простое гидродинамическое воздействие, т.е. как фрикционное торможение при диффузии одного компонента через другой [3,8]. Третий тип связи обусловлен действием интенсивных коротко действующих эксергетических сил, стремящихся обеспечить электронейтральность в электролитических растворах.

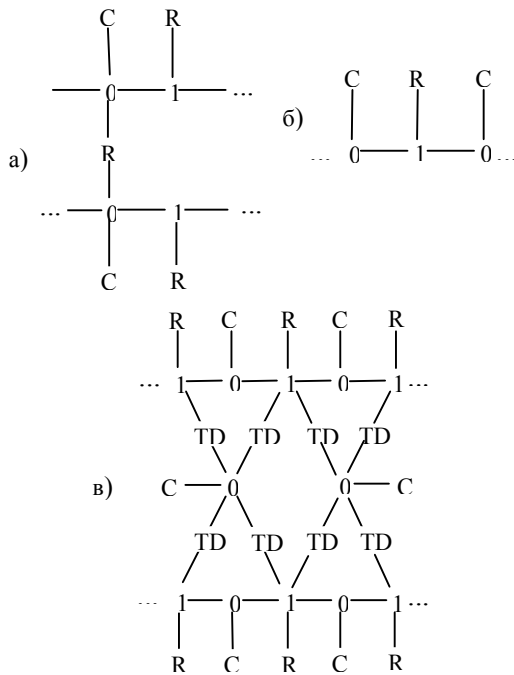


Рис. 1. Типовые эксерготермодинамические связи (топологоэксергетическое представление)

Во многих случаях все три взаимодействия могут существовать одновременно, что приводит к появ-

лению довольно сложных и неожиданных профилей эксергии, концентрации и определяет особенности эксергетической динамики ФТС.

3.2 Пример формирования топологоэксергетической структуры связей химической реакции

В качестве простого примера рассмотрим реакцию  $A + B \rightarrow 2C$ , топологоэксергетическая структура связи которой представлена на рис. 2. Требование стехиометрии представляет собой неэнергетическое ограничение, соответствующее линейному преобразованию переменных

$$(e_i^x, m_i) \rightarrow (v_i e_i^x, m_i/v_i) \approx (A_i^{\exists}, J^R) \quad (16)$$

Величину  $v_i e_i^x = A_i^{\exists}$  назовем «парциальным эксергетическим сродством», так что

$$A^{\exists} = -\sum_{i=1}^N A_i^{\exists} \quad (17)$$

Выражение (17) представляет собой определяющее отношение для преобразования в топологоэксергетической структуре связей по модулю  $v_i$

Эксергетическая диссипация вследствие реакции моделируется 1-связным резистором R с переменными типа эксергетического обобщенного усилия и обобщенного потока  $(A^{\exists}, J^R)$ .

Применяя алгоритм формирования математической модели ФТС [6], можно получить уравнение динамики ее эксергетического функционирования на основе разработанной топологоэксергетической структуры связей химической реакции  $A + B \rightarrow 2C$  (рис. 2).

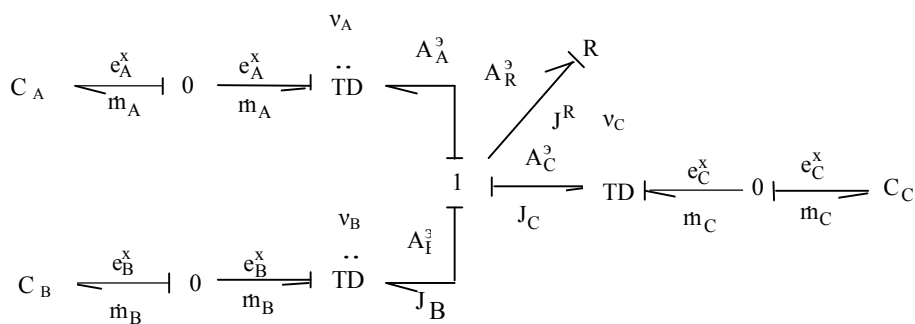


Рис. 2. Топологоэксергетическая структура связи химической реакции  $A + B = 2C$

**Выводы**

1. На основе теоретико-множественного подхода выполнен эксерготермодинамический анализ ФТС осложненных химическими реакциями.
2. Сформулированы энергетические аспекты топологоэксергетического метода описания ФТС.
3. Выявлены эксерготермодинамические особенности химических реакций.
4. Разработаны типовые топологические структуры связи физико-технологических систем, осложненных химическими реакциями.
5. На конкретном примере химической реакции построена ее топологоэксергетическая структура связей.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Кафаров В.В., Дорохов И.Н. Системный анализ процессов химической технологии. Основы стратегии. – М.: Наука, 1976.- 500с.
2. Кафаров В.В., Дорохов И.Н. Системный анализ процессов химической технологии. Топологический принцип формализации.- М.: Наука, 1979.- 394с.
3. Тучин В.Т., Дорохов И.Н., Горбачевич Л.Л. и др. Системный подход к моделированию массообменных процессов разложения карбоната свинца в аппарате фонтанирующего слоя// Материалы второй Всесоюзной научной конференции «Современные машины и аппараты химических производств», Чимкент, 1980 -Г.1.- С.149-152
4. Тучин В.Т. Системный подход к моделированию газодинамики верхней зоны доменной печи с помощью топологического метода описания физико-химических систем // Тезисы докладов Всесоюзного научно-технического семинара «Проблемы автоматизированного управления доменным производством», Киев, октябрь, 1983.-С.15.
5. Тучин В.Т., Кафаров В.В., Дорохов И.Н. Новый метод моделирования гидродинамики в аппаратах фонтанирующего слоя с помощью диаграмм связи // Докл. АН СССР, 1979, т.244, №23, с.664-668
6. Долгополов И.С., Тучин В.Т. Топологоэксергетический метод анализа энергосбережения физико-технологических систем // Промышленная тепло-техника. 2003, т.25, №24, С.116-118
7. Долгополов И.С., Тучин В.Т. Обобщенная эксергодиссипативная функция как основа тополого-эксергетического анализа физико-технологических систем. Сборник научных трудов Национальной металлургической академии Украины. Днепрпетровск: НМетАУ, т.5, 2002, С.67-71.
8. Тучин В.Т., Долгополов И.С., Тучин С.В. Топологический подход к определению эффективности совмещенных процессов химической реакции и диффузии. Металлургическая теплотехника: Сборник научных трудов Национальной металлургической академии Украины. - Днепрпетровск: НМетАУ, 2001, т.4, С.20-26
9. Братуга Э.Г., Долгополов И.С., Тучин В.Т. Топологоэксергетический подход к оценке энергозатрат в физико-технологических системах.// Интегровані технології та енергозбереження.-2003, 4. С. 20-27
10. Долгополов И.С., Тучин В.Т., Тучина У.Н. Разработка топологоэксергетического метода анализа энергосбережения физико-технологических систем // Збірник тез доповідей 4-ї Всеукраїнської науково-методичної конференції “Екологія та інженерія. Стан, наслідки, шляхи створення екологічно чистих технологій”, Дніпродзержинськ, 2002, С.235-236
11. Долгополов И.С., Никулин А.В., Тучин В.Т. Эксергетический аспект в системе фундаментальных уравнений ФТС // III Всеукраинская научная конференция «Математические проблемы технической механики» (материалы конференции). Днепродзержинск, 2003, с.49.
12. Тучин В.Т., Долгополов И.С., Братуга Э.Г., Тучина У.Н. Энергетические аспекты топологоэксергетического метода анализа физико-технологических систем (ФТС) – Часть 1// Интегровані технології та енергозбереження.-2004.-№4.- С.81-89.
13. Тучин В.Т., Долгополов И.С., Братуга Э.Г., Тучина У.Н. Энергетические аспекты топологоэксергетического метода анализа физико-технологических систем (ФТС) – Часть2 // Интегровані технології та енергозбереження.-2005.-№4.- С.36-42.
14. Долгополов И.С., Тучин В.Т., Шрамко О.А. Новые узлы разделения в топологоэксергетическом методе моделирования физико-технологических систем (ФТС) // Математическое моделирование.-2003.-№ 1(9).С. 56-60
15. B.D.H.Tellegen. A General Network Theorem, with Applications. Philips Res.Rep., 7, 1952. P. 254-269
16. Озолинг И.Х., Степанов В.С. Упрощенная методика расчета химической энергии и эксергии веществ //Известия вузов. Энергетика.- 1979.- № 10.- С.60-64
17. Oster G. and Auslander D. Topological Representations of Thermodynamic Systems. I. Basic Concept; II Some Elemental Subunits for Irreversible Thermodynamics. J. Franklin Institute Vol.291. 1977, P.1, P.77
18. Де Гроот, Мазур П. Неравновесная термодинамика. – М.: Мир, 1964.- 456 с.
19. Oster G., Perelson A. and Katchalsky A. Network thermodynamics: The Analysis of Biomedical Systems. Quarterly Reviews of Biophysics, 1973, 6, P.1-134
20. Rosenberg R.C., Karnopp D.C. Introduction to Physical System Dynamics. 1983. Mc Grow – Hill, Inc., 420 p.

пост. 17.11.05