

## 2.3 单级精馏计算

2.3.1 多组分泡点计算

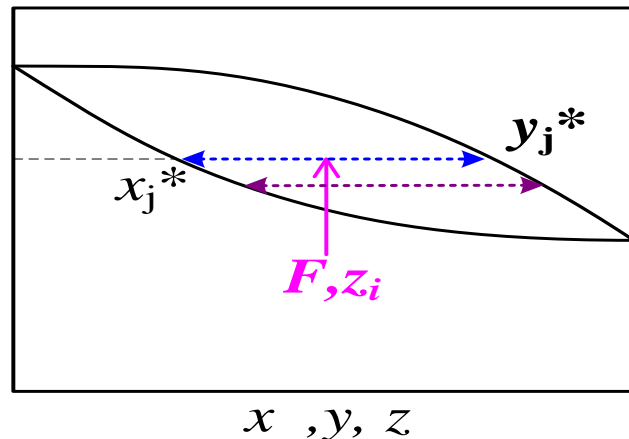
2.3.2 多组分露点计算

★2.3.3 等温闪蒸计算

★2.3.4 绝热闪蒸计算

# 什么是闪蒸?

- ❖ 闪蒸是连续单级蒸馏过程。
- ❖ 进入闪蒸器的物料，应为汽液两相共存的状态；通过相分离，得到含易挥发组分较多的汽相和含难挥发组分较多的液相。

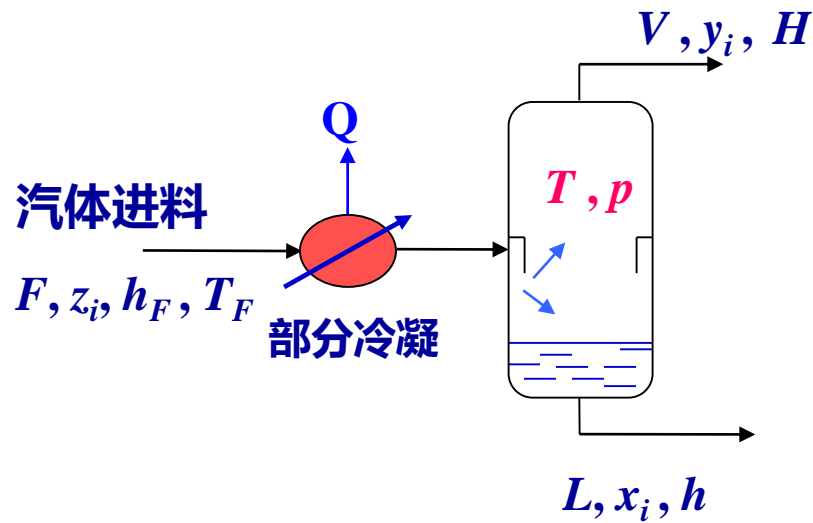
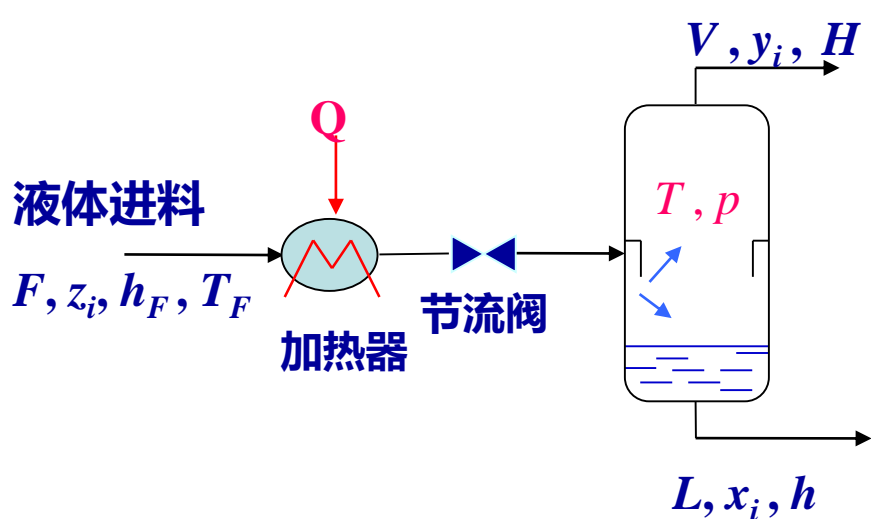


🌀 等温闪蒸  $P, t \longrightarrow V, L, y_i, x_i, Q$

🌀 绝热闪蒸  $P, Q = 0 \longrightarrow V, L, y_i, x_i, t$

精馏塔中的平衡级就是一简单绝热闪蒸级。

## 2.3.3 等温闪蒸计算



部分汽化:  $L \xrightarrow{P \downarrow} L + V$

部分冷凝:  $V \xrightarrow{T \downarrow} L + V$

已知  $F, z_i, T, p \rightarrow V, y_i, L, x_i$

# 1. 基本方程

## 第2章 多组分精馏

相平衡关系  $y_i = K_i x_i \quad (i = 1, \dots, c)$

组分物料衡算  $Fz_i = Vy_i + Lx_i \quad (i = 1, \dots, c)$

归一方程  $\sum_i z_i = \sum_i x_i = \sum_i y_i = 1 \quad 3$

相平衡常数式  $K_i = f(T, p, x_i, y_i) \quad i = 1, \dots, c$

变量数  $F, V, L, T, p, x_i, y_i, z_i, K_i \quad (4c+5)$

方程数  $(3c+3)$

自由度=变量数-方程数=  $c+2$

如果给定  $F, T, p, z_i (i=1, \dots, c-1)$ , 则可以得到唯一解

## 联立计算

$$x_i = \frac{z_i}{(K_i - 1)e + 1} \quad (\text{A})$$

$$y_i = \frac{K_i z_i}{(K_i - 1)e + 1} \quad (\text{B})$$

汽化率  $e = V/F$  ,  $V = Fe$  ,  $L = (1-e)F$

## 闪蒸方程式

$$\sum (y_i - x_i) = 0$$



$$G(e) = \sum (y_i - x_i) = \sum \frac{(K_i - 1)z_i}{(K_i - 1)e + 1} = 0 \quad (\text{C}) \quad \text{Rachford-Rice方程}$$

进行闪蒸计算之前，要核实问题是否成立。

$T_b < T < T_d$ ，构成闪蒸。

## 2. 核实方法

已知 $z_i, T, p$  $BP$ 

泡点核实

$\Sigma K_i z_i$

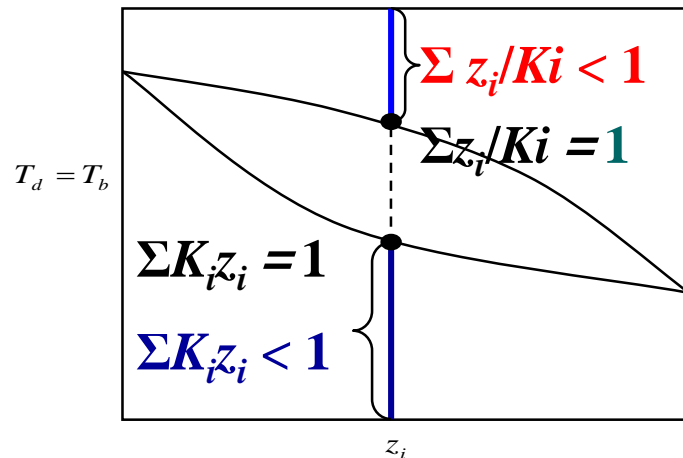
$< 1$ , 过冷液体  
 $= 1$ , 泡点  
 $> 1$ , 不能确定

 $DP$ 

露点核实

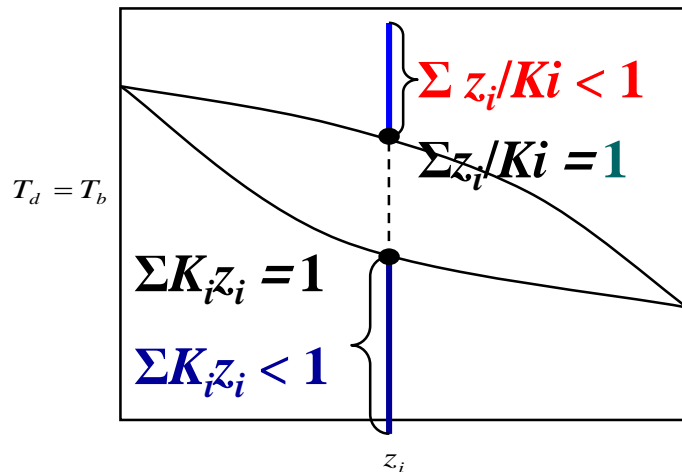
$\Sigma z_i / K_i$

$< 1$ , 过热蒸汽  
 $= 1$ , 露点  
 $> 1$ , 不能确定



**两相区：**  $T_d > T > T_b$

$$\sum_i K_i z_i > 1, \sum_i z_i / K_i > 1$$



闪蒸问题成立的前提是，混合在指定温度和压力下处于两相区。

所指定的温度**高于露点温度，或低于泡点温度**，则所指定的温度下**不可能实现闪蒸**。

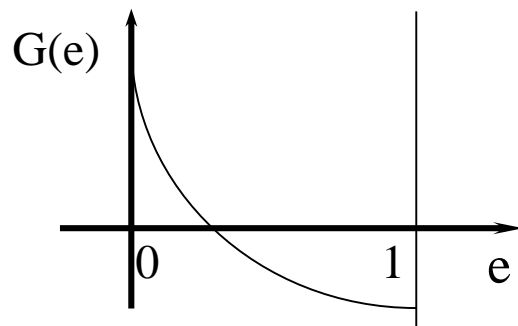
# 3. 计算步骤

1. 先设定汽化率 $e$ 初值

2. 迭代求解 $e$

3. 计算 $V, L, x_i, y_i$

$$\begin{cases} e = 0.5 \\ e = \frac{T - T_b}{T_d - T_b} \end{cases}$$



目标函数:  $G = \sum_{i=1}^c (y_i - x_i) = \sum_{i=1}^c \frac{z_i (K_i - 1)}{(K_i - 1)e + 1}$  (D)

$$G' = - \sum \frac{z_i (K_i - 1)^2}{[1 + e(K_i - 1)]^2}$$
 (E)



牛顿迭代法:

$$e^{(r+1)} = e^{(r)} - \frac{G^{(r)}}{G'^{(r)}}$$

(F)



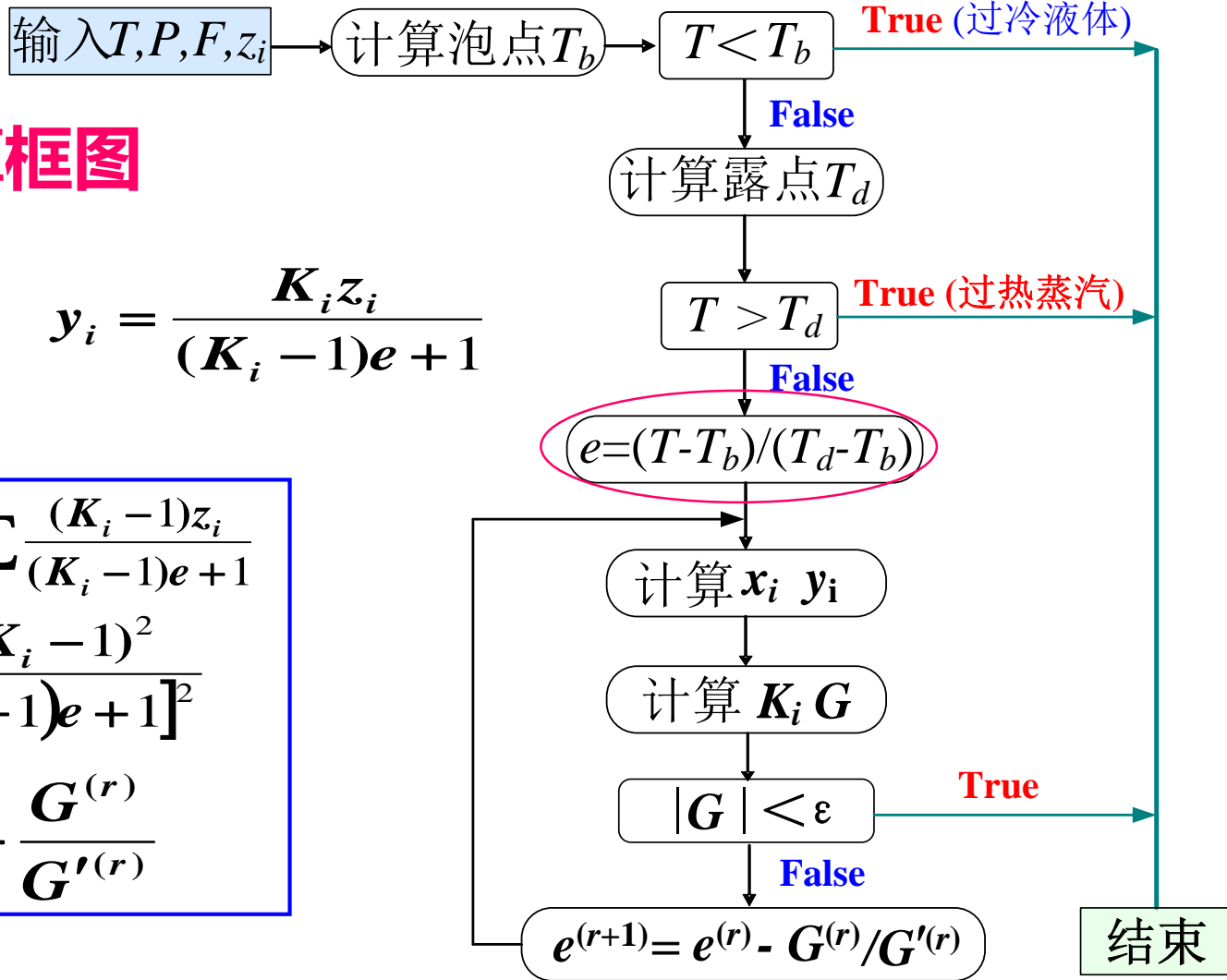
# 等温闪蒸计算框图

$$x_i = \frac{z_i}{(K_i - 1)e + 1} \quad y_i = \frac{K_i z_i}{(K_i - 1)e + 1}$$

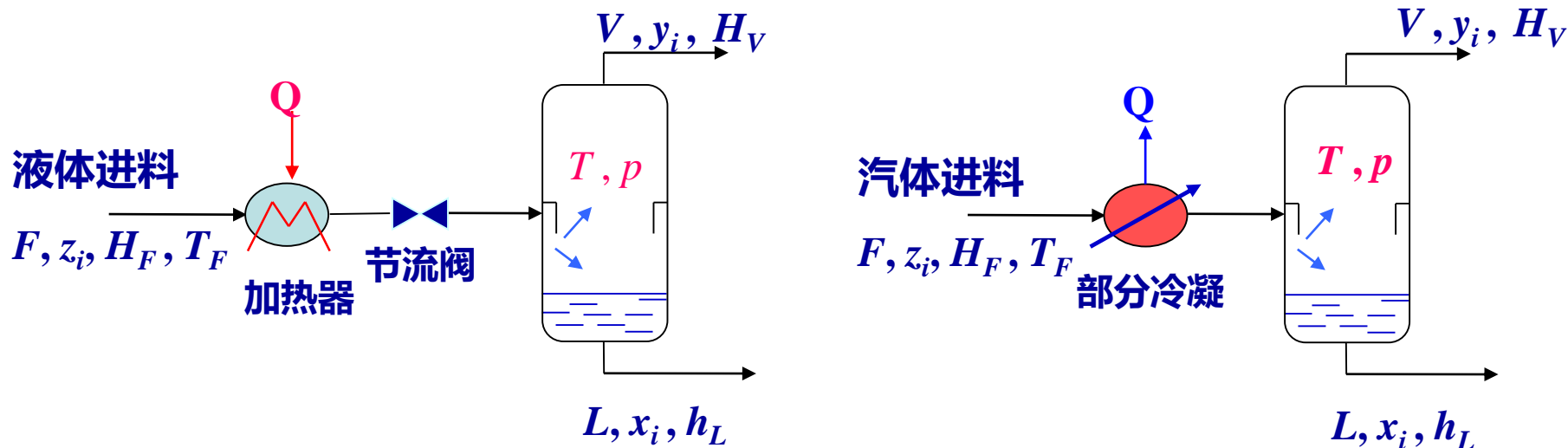
$$G(e) = \sum (y_i - x_i) = \sum \frac{(K_i - 1)z_i}{(K_i - 1)e + 1}$$

$$G' = -\sum_i \frac{z_i (K_i - 1)^2}{[(K_i - 1)e + 1]^2}$$

$$e^{(r+1)} = e^{(r)} - \frac{G^{(r)}}{G'^{(r)}}$$



## 等温闪蒸热负荷



在通过迭代得到收敛的  $V, y_i, L, x_i$  后, 通过有关热力学方程, 分别计算  $F$ 、 $V$ 、 $L$  的摩尔焓值

由热量衡算得

$$Q = VH + Lh - Fh_F$$

## 例题2-2

## 第2章 多组分精馏

进料中，苯（1）-甲苯（2）-二甲苯（3）的摩尔分数分别为0.6, 0.3, 0.1。常压下操作，若进料温度为92°C，确定进料状态。如果符合闪蒸问题，求100kmol/h进料在温度92°C，常压下闪蒸后汽、液相组成及流率。

**假设液相服从拉乌尔定律，汽相可作为理想气体。三个组分的蒸汽压分别用下列各式计算：**

$$\left. \begin{aligned} \ln p_1^s &= 15.9008 - 2788.51/(T - 52.36) \\ \ln p_2^s &= 16.0137 - 3096.52/(T - 53.67) \\ \ln p_3^s &= 16.1390 - 3366.99/(T - 58.04) \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} p_i^s - \text{mmHg} \\ T - K \end{array}$$

## 确定进料状态:

**解:**  $t = 92^{\circ}\text{C}$ 时,  $p_1^s = 1081.21\text{mmHg}$ ,  $p_2^s = 433.71\text{mmHg}$ ,  
 $p_3^s = 176.89\text{ mmHg}$

$$K_i = p_i^s / P, \quad K_1 = 1.4227, \quad K_2 = 0.5707, \quad K_3 = 0.2328$$

设 $92^{\circ}\text{C}$ 为**泡点温度**:

$$\Sigma y_i = \Sigma z_i \times K_i = 1.048 > 1 \quad (\text{料液温度 } T > T_b)$$

设 $92^{\circ}\text{C}$ 为**露点温度**:

$$\Sigma x_i = \Sigma z_i / K_i = 1.376 > 1 \quad (T < T_d)$$

$\therefore$   $92^{\circ}\text{C}$ 进料, 是**汽液两相混合进料**。

气化分率初值取  $e_0 = 0.5$

$$G(e_0) = \sum_{i=1}^C \frac{z_i (K_i - 1)}{(K_i - 1)e_0 + 1} = -0.07909$$

$$G'(e_0) = -\sum_{i=1}^C \frac{z_i (K_i - 1)^2}{[(K_i - 1)e_0 + 1]^2} = -0.31762$$

$$e_1 = e_0 - \frac{G(e_0)}{G'(e_0)} = 0.5 - \frac{-0.07909}{-0.31762} = 0.2510$$

$$G(e_1) = \sum_{i=1}^C \frac{z_i (K_i - 1)}{(K_i - 1)e_1 + 1} = -0.0101$$

本问题, 1次迭代后接近收敛。

# 收敛进程

# 第2章 多组分精馏

$$e^{(r+1)} = e^{(r)} - \frac{G(e^{(r)})}{G'(e^{(r)})}$$

$$G(e) = \sum_{i=1}^c \frac{Z_i(K_i - 1)}{(K_i - 1)e + 1}$$

$$G'(e) = -\sum \frac{Z_i(K_i - 1)^2}{[1 + e(K_i - 1)]^2}$$

气化分率e		G(e)		G '(e)	
e <sup>(0)</sup>	0.5	G(e <sup>(0)</sup> )	-0.0791	G '(e <sup>(0)</sup> )	-0.3176
e <sup>(1)</sup>	0.2510	G(e <sup>(1)</sup> )	-0.0101	G '(e <sup>(1)</sup> )	-0.2474
e <sup>(2)</sup>	0.2103	G(e <sup>(2)</sup> )	-0.0001	G '(e <sup>(2)</sup> )	-0.2409
e <sup>(3)</sup>	0.2097	G(e <sup>(3)</sup> )	-2.3e-8	G '(e <sup>(3)</sup> )	-

对于本题，3次迭代已经达到收敛。

闪蒸后汽、液相流率:  $V = eF = 20.97 \text{ kmol} / \text{h}$

$$L = (1 - e)F = 79.03 \text{ kmol} / \text{h}$$

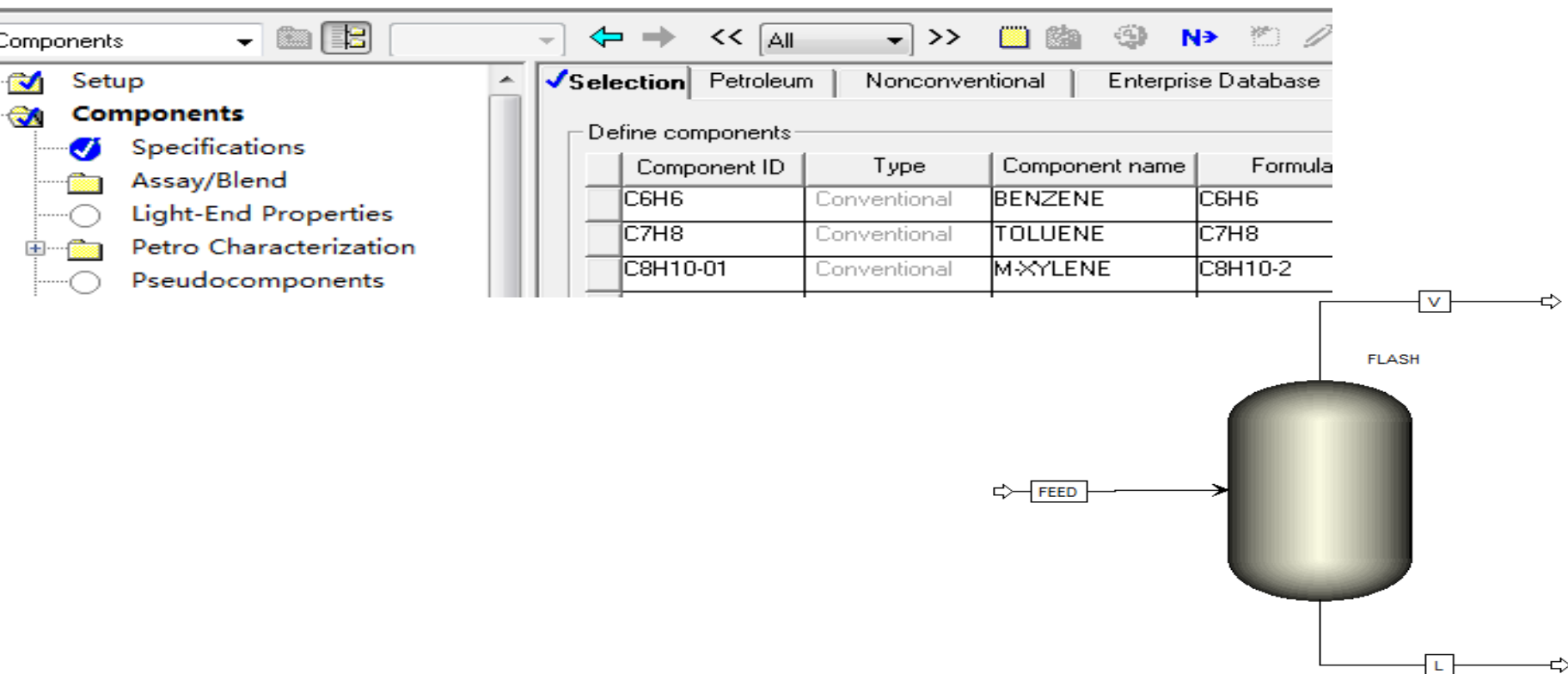
闪蒸后汽、液相组成:

$$y_1 = 0.7841, y_2 = 0.1882, y_3 = 0.0277$$

$$x_1 = 0.5511, x_2 = 0.3297, x_3 = 0.1192$$

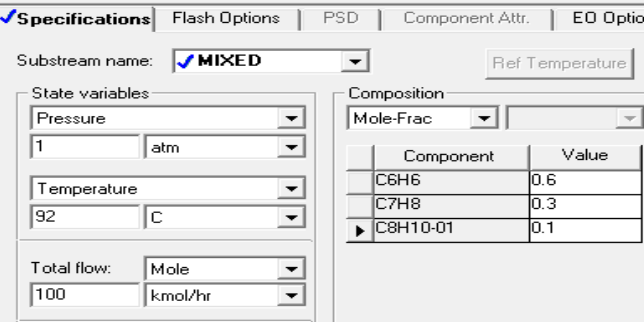
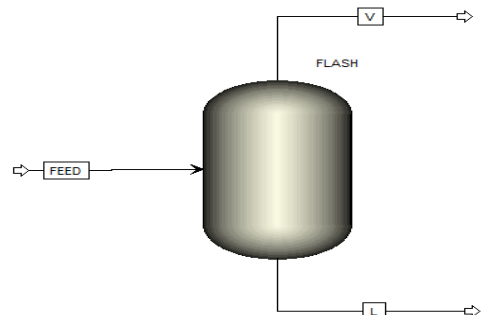
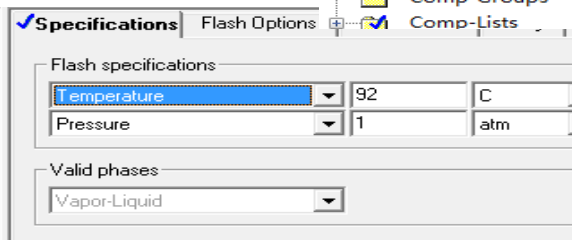
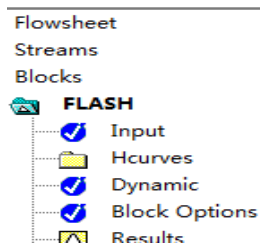
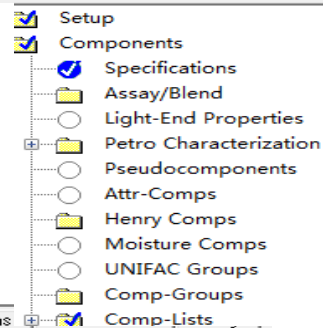
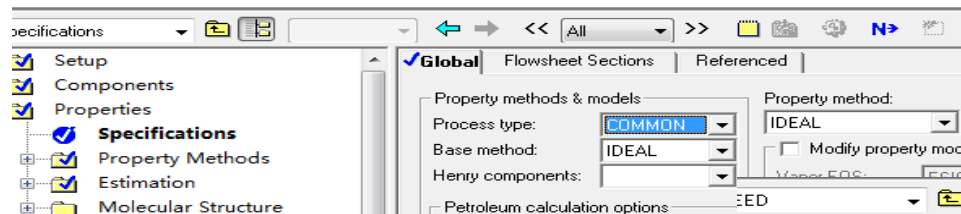
# 解二 流程模拟计算

## 第2章 多组分精馏



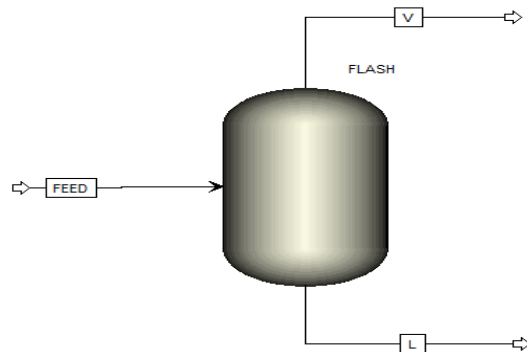


## ● 热力学模型用IDEAL



## 第2章 多组分精馏

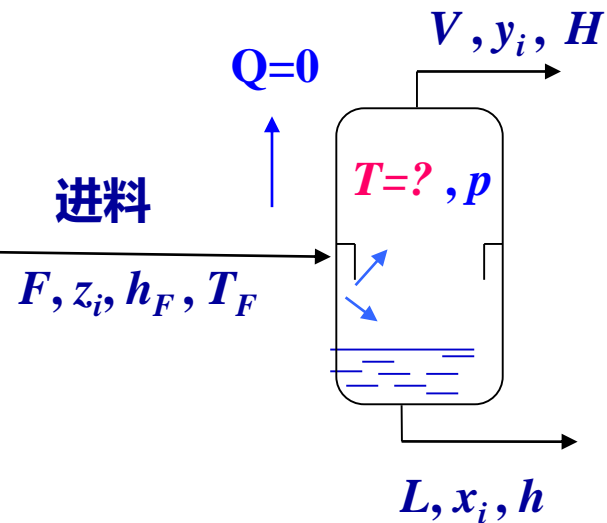
Flowsheet	Summary	Balance	Phase Equilibrium	Utility Usage
Streams	Block results summary			
Blocks				
FLASH				
<input checked="" type="checkbox"/> Input				
<input type="checkbox"/> Hcurves				
<input checked="" type="checkbox"/> Dynamic				
<input checked="" type="checkbox"/> Block Options				
	Outlet temperature:	365.15	K	
	Outlet pressure:	101325	N/sqm	
	Vapor fraction:	0.20552453		
	Heat duty:	0	Watt	
	Net duty:	0	Watt	



	FEED	L	V
Mole Frac			
C6H6	.6000000	.5521595	.7849323
C7H8	.3000000	.3291220	.1874261
C8H10-01	.1000000	.1187185	.0276416
Total Flow kmol/sec	.02777777	.0220687	5.70902E-3
Total Flow kg/sec	2.364641	1.899253	.4653880
Total Flow cum/sec	.1734369	2.37898E-3	.1710579
Temperature K	365.1500	365.1500	365.1500
Pressure N/sqm	1.01325E+5	1.01325E+5	1.01325E+5
Vapor Frac	.2055245	0.0	1.000000
Liquid Frac	.7944755	1.000000	0.0

- 热力学模型用IDEAL
- 汽化率  $e = V/F = 0.2055$

## 2.3.4 绝热闪蒸计算



热量衡算方程

闪蒸方程

$$Q = 0$$

$$Fh_F + Q = VH + Lh$$

$$F(t) = Fh_F - VH - Lh = 0$$

$$G(e) = \sum (y_i - x_i) = \sum \frac{(K_i - 1)z_i}{(K_i - 1)e + 1} = 0$$

# 迭代计算方法

(1) 宽沸程物系:  $e$  对  $T$  不敏感

用热量衡算方程迭代  $T$  ; 用闪蒸方程迭代  $e$  :

外层循环

内层循环

(2) 窄沸程物系:  $e$  对  $T$  敏感

用热量衡算方程迭代  $e$  ; 用闪蒸方程迭代  $T$  :

外层循环

内层循环

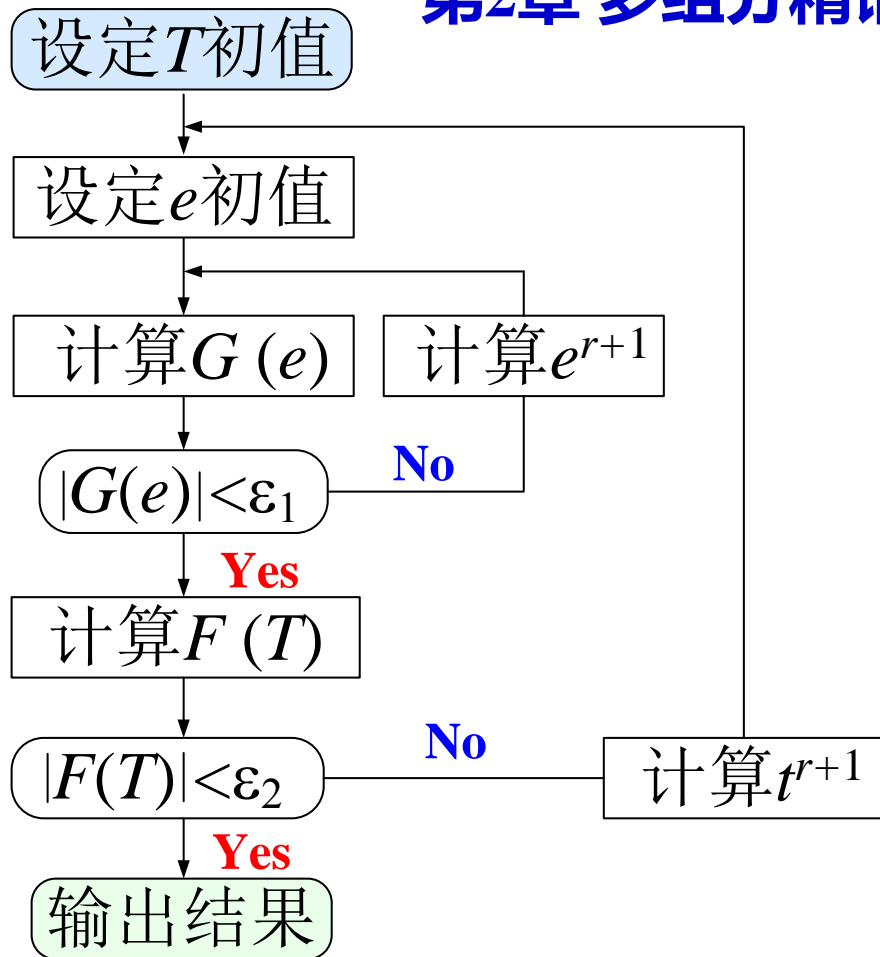
# 宽沸程物系

## 第2章 多组分精馏

$$G(e) = \sum (y_i - x_i) \\ = \sum \frac{(K_i - 1)z_i}{(K_i - 1)e + 1} = 0$$

$$F(T) = h_F - eH - (1 - e)h = 0$$

$$F(T) = \frac{h_F - eH - (1 - e)h}{1000} = 0$$



# 窄沸程物系

## 第2章 多组分精馏

$$G(T) = \sum \frac{(K_i - 1)z_i}{(K_i - 1)e + 1} = 0$$

$$F(e) = h_F - eH - (1 - e)h = 0$$

$$e = \frac{h_F - h}{H - h}$$

