

Ю. А. Комиссаров, Дам Куанг Шанг

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И АЛГОРИТМ РАСЧЕТА ПРОЦЕССА РЕКТИФИКАЦИИ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СИСТЕМ

Ключевые слова: математическая модель, алгоритм, ректификация, многокомпонентные системы, точка кипения, уравнение состояния.

На основе метода независимого определения концентраций использованием трехдиагональной матрицы [1, 2, 3], авторы создали эффективный алгоритм для моделирования и расчета процесса ректификации многокомпонентных смесей. Алгоритм позволяет рассчитать процесс ректификации с питаниями в виде кипящей жидкости, пара или обеих этих состояний. В этой работе коэффициент равновесия системы пар-жидкость и энтальпия фаз рассчитаны с помощью уравнения состояния Соавы-Редлиха-Квонга (СРК).

Key words: mathematical model, algorithm, distillation, multi-component systems, bubble point, the equation of state.

On the basis of the independent determination of the concentration method by using tridiagonal matrix [1, 2, 3], the authors have created a efficient algorithm for modeling and calculation of the distillation of multi-component systems. Algorithm allows to calculate process of distillation with the feeds in the form of boiling liquid, vapor or both of these states. In this paper, the equilibrium ratio of the vapor-liquid phase and the enthalpy of phases are calculated by using the equation of state Soave-Redlich-Kwong (SRK).

1. Математическое описание процесса ректификации

Рассмотрим процесс ректификации, схема потоков которого приведена на рис. 1. Ректификационная колонна содержит N тарелок, смесь состоит из C компонентов. Тогда математическая модель в соответствии со схемой рис.1 для этой системы будет иметь вид:

– *уравнение покомпонентного материального баланса*

$$M_{i,j} = L_{j-1}x_{i,j-1} + V_{j+1}y_{i,j+1} + F_j^L z_{i,j}^L + F_{j+1}^V z_{i,j+1}^V - (L_j + U_j)x_{i,j} - (V_j + W_j)y_{i,j} = 0, \quad (1)$$

– *уравнение фазового равновесия*

$$E_{i,j} = y_{i,j} - K_{i,j}x_{i,j} = 0. \quad (2)$$

– *уравнения стехиометрических соотношений*

для жидкой фазы:

$$S_j^L = \sum_{i=1}^C x_{i,j} - 1 = 0; \quad (3)$$

для паровой фазы:

$$S_j^V = \sum_{i=1}^C y_{i,j} - 1 = 0, \quad (4)$$

– *уравнения теплового баланса*

$$H_j = L_{j-1}H_{j-1}^L + V_{j+1}H_{j+1}^V + F_j^L H_j^{FL} + F_{j+1}^V H_{j+1}^{FV} - (L_j + U_j)H_j^L - (V_j + W_j)H_j^V - Q_j = 0, \quad (5)$$

где $L_j, V_j, W_j, U_j, F_j, z_{i,j}, x_{i,j}, y_{i,j}$ – (табл.1); $H_j^{FL}, H_j^{FV}, F_j^L, F_j^V, z_{i,j}^L, z_{i,j}^V$ – соответственно энтальпии H , количества F , составы z жидкой и паровой фаз питания; $1 \leq i \leq C; 1 \leq j \leq N$; $L_0 = 0; V_{N+1} = 0; F_{N+1}^V = 0$.

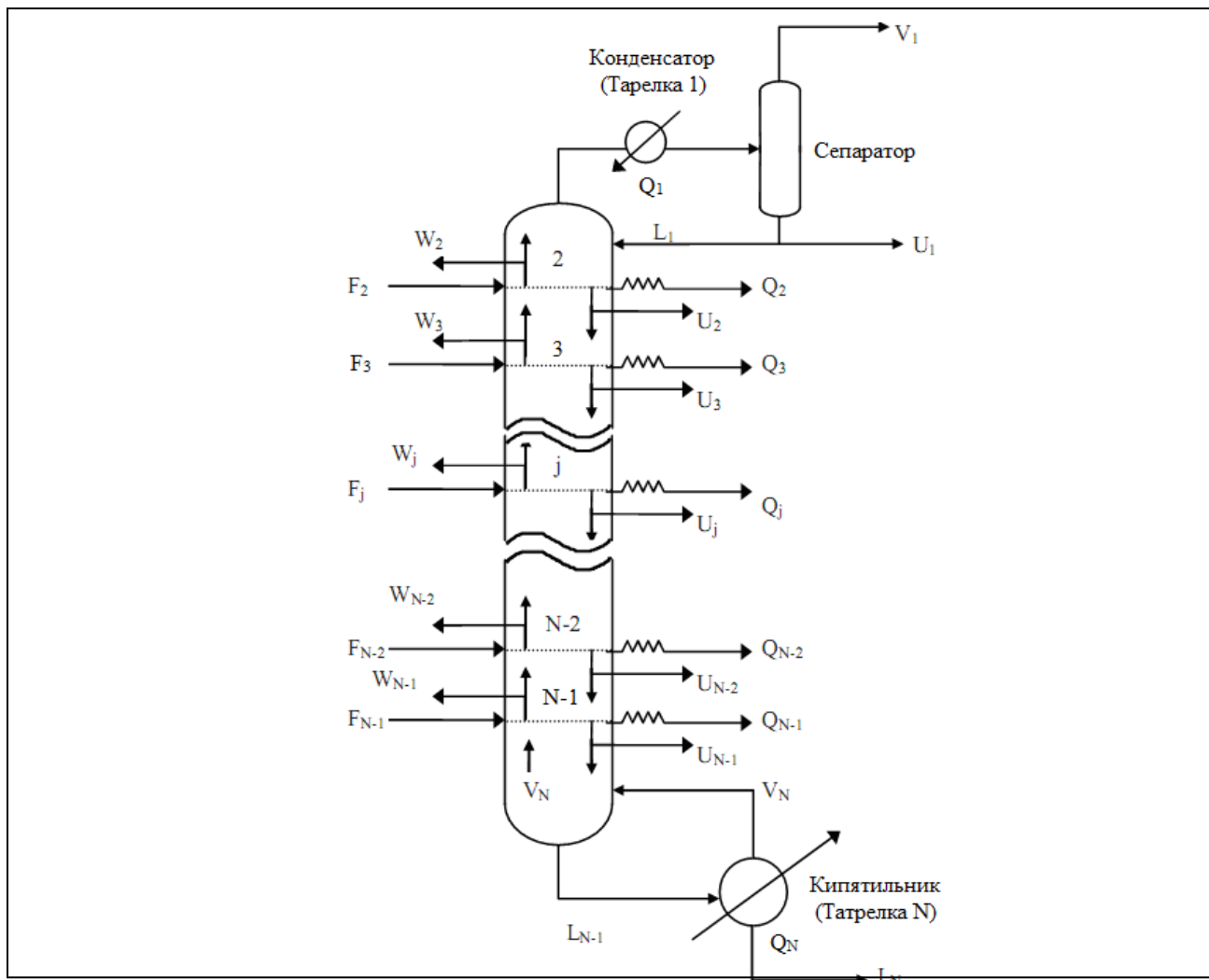


Рис. 1 - Структурная схема парожидкостных и тепловых потоков в ректификационной колонне

В приведенных уравнениях

$$K_{i,j} = K_{i,j}(T_j, P_j, X_j, Y_j), \quad (6)$$

$$H_j^L = H_j^L(T_j, P_j, X_j), \quad (7)$$

$$H_j^V = H_j^V(T_j, P_j, Y_j), \quad (8)$$

где $X_j = (x_{1,j}, x_{2,j}, \dots, x_{C,j})$; $Y_j = (y_{1,j}, y_{2,j}, \dots, y_{C,j})$.

Тогда задача сводится к решению $N(3+2C)$ независимых уравнений, перечисленных ниже:

Уравнения	Количество
Уравнение покомпонентного материального баланса	$N \times C$
Уравнение фазового баланса	$N \times C$
Уравнение стехиометрического соотношения	$2 \times N$
Уравнение теплового баланса	N
Сумма	$N(3+2C)$

2. Выбор независимых переменных

Из раздела 1 имеется система $N(3+2C)$ независимых уравнений, поэтому необходимо выбрать $N(3+2C)$ независимых переменных. В табл. 1 показан список выбранных независимых переменных. Остальные переменные являются исходными данными.

Таблица 1 - Список исходных и независимых переменных

Переменный	Число	Исход.	Независ.
Потоки жидкости и пара ($L_j; V_j$)	$2 \times N$	$L_1; V_1$	$2 \times N - 2$
Нагрузка теплоты (Q_j)	N	$N - 2$	Q_1, Q_N
Питание на каждую тарелку (F_j)	N	N	
Давление питания (P_j^F)	N	N	
Температура питания (T_j^F)	N	N	
Состав питаний ($z_{i,j}$)	$N \times C$	$N \times C$	
Боковые отборы (U_j, W_j)	$2 \times N$	$2 \times N$	
Температура на тарелке (T_j)	N		N
Давление на каждой тарелке (P_j)	N	N	
Состав жидкой и паровой фаз на каждой тарелке ($x_{i,j}; y_{i,j}$)	$2 \times N \times C$		$2 \times N \times C$
Сумма	$N \times (3C + 10)$	$N \times (C + 7)$	$N \times (2C + 3)$

3. Метод независимого определения концентраций с использованием трехдиагональной матрицы для расчета процесса ректификации

Идеей этого метода является разделение системы уравнений на три группы (уравнения покомпонентного материального баланса, уравнения фазового равновесия и уравнения теплового баланса), которые решаются не одновременно, а последовательно по группам итерационным методом [1, 2, 3]. Однако его недостатками являются использование простых термодинамических моделей для расчета энтальпии, и не возможность расчета при условии, когда питание содержит жидкую и паровую фазы. В работе [4] предложена модификация этого метода, позволяющая рассчитать процесс ректификации ширококипящих смесей. В данной статье авторы добавили процедуру расчета состава фаз и энтальпии питаний при заданных давлении и температуре [1, 3, 5], а также использовали уравнение состояния СРК [2, 6] для определения коэффициента равновесия пар-жидкость и энтальпии фаз. Это позволяет рассчитать процесс ректификации с питаниями в виде кипящей жидкости, пара или обеих этих состояний, а также обеспечивает высокую точность. На *первой итерации* коэффициент парожидкостного равновесия компонентов определяется с помощью модели Чео-Сидера.

3.1 Расчет состава фаз и энтальпии в питании

Для каждого питания мы имеем количество F_j и состав $z_{i,j}$ при давлении P_j^F и температуре T_j^F . Тогда необходимо определить количество F_j^V , F_j^L , концентрации $z_{i,j}^V$, $z_{i,j}^L$ и энтальпии H_j^{FV} , H_j^{FL} паровой и жидкой фаз питания соответственно. Для этого используется метод расчета парожидкостного равновесия [1, 3, 5].

3.2 Начальный профиль температуры и потоков по паровой фазе

Задаем начальный профиль температур линейной интерполяцией между предполагаемой температурой верхней и нижней частями колонны:

$$\Delta T = \frac{T_{\text{низ}} - T_{\text{верх}}}{N-1}; \quad T_1 = T_{\text{верх}}; \quad T_j = T_{j-1} + \Delta T, \quad (2 \leq j \leq N). \quad (9)$$

Начальный профиль потока по паровой фазе вычисляется из предположения постоянного молярного расхода:

$$V_2 = V_1 + (L_1 + U_1); \quad V_{j+1} = V_j, \quad (2 \leq j \leq N-1). \quad (10)$$

3.3 Расчет профиля концентрации жидкой фазы

Уравнение общего материального баланса сечения колонны относительно верха имеет вид:

$$V_j - L_{j-1} + F_j^V + \sum_{m=1}^{j-1} (F_m^V + F_m^L - W_m - U_m) - V_1 = 0.$$

Отсюда:

$$L_{j-1} = V_j + F_j^V + \sum_{m=1}^{j-1} (F_m^V + F_m^L - W_m - U_m) - V_1. \quad (11)$$

Заменяя $y_{i,j}$ и L_j в уравнении (1) соответственно $K_{i,j}x_{i,j}$ (уравнение 2), а также используя выражение (11), получим:

$$A_j x_{i,j-1} + B_j x_{i,j} + C_j x_{i,j+1} = D_j, \quad (12)$$

где

$$A_j = V_j + F_j^V + \sum_{m=1}^{j-1} (F_m^V + F_m^L - W_m - U_m) - V_1 \quad (2 \leq j \leq N);$$

$$B_j = - \left[V_{j+1} + F_{j+1}^V + \sum_{m=1}^j (F_m^V + F_m^L - W_m - U_m) - V_1 + U_j + (V_j + W_j) K_{ij} \right] \quad (1 \leq j \leq N);$$

$$C_j = V_{j+1} K_{i,j+1} \quad (1 \leq j \leq N-1); \quad D_j = -F_j^L z_{ij}^L - F_{j+1}^V z_{i,j+1}^V \quad (1 \leq j \leq N);$$

$$x_{i,0} = 0; \quad x_{i,N+1} = 0; \quad F_{N+1}^V = 0; \quad z_{i,N+1}^V = 0.$$

Таким образом, мы получили систему линейных уравнений в виде трехдиагональной матрицы:

$$\begin{bmatrix} B_1 & C_1 & 0 & . & . & . & . & . & . & 0 \\ A_2 & B_2 & C_2 & & & & & & & 0 \\ 0 & A_3 & B_3 & C_3 & & & & & & 0 \\ . & & . & . & . & & & & & . \\ . & & & . & . & . & & & & . \\ . & & & & . & . & . & & & . \\ . & & & & & . & . & . & & . \\ . & & & & & & . & . & . & . \\ . & & & & & & & A_{N-1} & B_{N-1} & C_{N-1} \\ 0 & . & . & . & . & . & . & . & A_N & B_N \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} x_{i,1} \\ x_{i,2} \\ x_{i,3} \\ . \\ . \\ . \\ . \\ . \\ . \\ x_{i,N-1} \\ x_{i,N} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D_3 \\ . \\ . \\ . \\ . \\ . \\ . \\ D_{N-1} \\ D_N \end{bmatrix}.$$

При решении этой системы методом Томаса [1, 3], основанным на приведении к диагональному виду путем элементарных преобразований по рекуррентным формулам, получим $x_{i,j}$ ($1 \leq j \leq N$). Такой процесс расчета повторяется для каждого компонента.

3.4 Профиль концентрации жидкой фазы по высоте колонны

Рассчитанный состав жидкой фазы необходимо пронормировать по формуле:

$$x_{i,j}^{(норм)} = \frac{x_{i,j}}{\sum_{k=1}^C x_{k,j}} \quad (1 \leq j \leq N; 1 \leq i \leq C). \quad (13)$$

3.5 Расчет нового профиля температуры и состава паровой фазы

Для расчета новой температуры и состава паровой фазы можно использовать алгоритм расчета точки кипения [1, 4] на каждой тарелке при известных составе $x_{i,j}$ и давлении P_j жидкой фазы. Уравнение расчета точки кипения для j -ой тарелки выражается:

$$\sum_{i=1}^C y_{i,j} - 1 = \sum_{i=1}^C K_{i,j} x_{i,j} - 1 = 0, \quad (14)$$

где $K_{i,j}$ – коэффициент равновесия пар-жидкость по уравнению СРК.

3.6 Расчет нового профиля потоков паровой фазы

Значение парового потока V_2 (рис. 1) получено по уравнению общего материального баланса для первой тарелки (конденсатор):

$$V_2 = V_1 + L_1 + U_1.$$

Заменяя L_{j-1} и L_j в уравнении теплового баланса (5) выражением (9), получим:

$$V_j = \frac{\gamma_{j-1} - \alpha_{j-1} V_{j-1}}{\beta_{j-1}}, \quad (j = 3 \div N) \quad (15)$$

где $\alpha_j = H_{j-1}^L - H_j^V$; $\beta_j = H_{j+1}^V - H_j^L$;

$$\gamma_j = \left[\sum_{m=1}^{j-1} (F_m - W_m - U_m) + F_j^V - V_1 \right] (H_j^L - H_{j-1}^L) + F_{j+1}^V (H_j^L - H_{j+1}^V) + F_j^L (H_j^L - H_j^{Fi}) + W_j (H_j^V - H_j^L) + Q_j.$$

3.7 Расчет профиля потоков жидкой фазы

Из уравнения (11) получим:

$$L_j = V_{j+1} + F_{j+1}^V + \sum_{m=1}^j (F_m^V + F_m^L - U_m - W_m) - V_1 \quad (1 \leq j \leq N), \quad (16)$$

где $V_{N+1} = 0$; $F_{N+1}^V = 0$.

3.8 Проверка сходимости расчета

Процедура заканчивается при удовлетворении условия:

$$\sum_{j=1}^N \left[\frac{T_j^{(k)} - T_j^{(k-1)}}{T_j^{(k)}} \right]^2 + \sum_{j=1}^N \left[\frac{V_j^{(k)} - V_j^{(k-1)}}{V_j^{(k)}} \right]^2 \leq \varepsilon. \quad (17)$$

где ε – заданная ошибка. В работе [3] Ванга и Хенка предложен следующий критерий:

$$\tau = \sum_{j=1}^N [T_j^{(k)} - T_j^{(k-1)}]^2 \leq 0,01N, \quad (18)$$

где $T_j^{(k)}, T_j^{(k-1)}$ – соответственно значения температуры на j -ой тарелке k -ой и $(k-1)$ -ой итераций.

3.9 Расчет отвода и подвода теплоты Q_1 и Q_N

После того, как критерий сходимости выполняется, отвод и подвод теплоты рассчитываются по формулам:

$$Q_1 = V_2 H_2^V - [V_1 H_1^V + (L_1 + U_1) H_1^L], \quad (19)$$

$$Q_N = \sum_{j=1}^N (F_j^V H_j^{FV} + F_j^L H_j^{FL} - U_j H_j^L - W_j H_j^V) - \sum_{j=1}^{N-1} Q_j - V_1 H_1^V - L_N H_N^L. \quad (20)$$

На рис. 2 приведена блок-схема алгоритма метода независимого определения концентраций с использованием трехдиагональной матрицы для расчета процесса ректификации многокомпонентных систем.

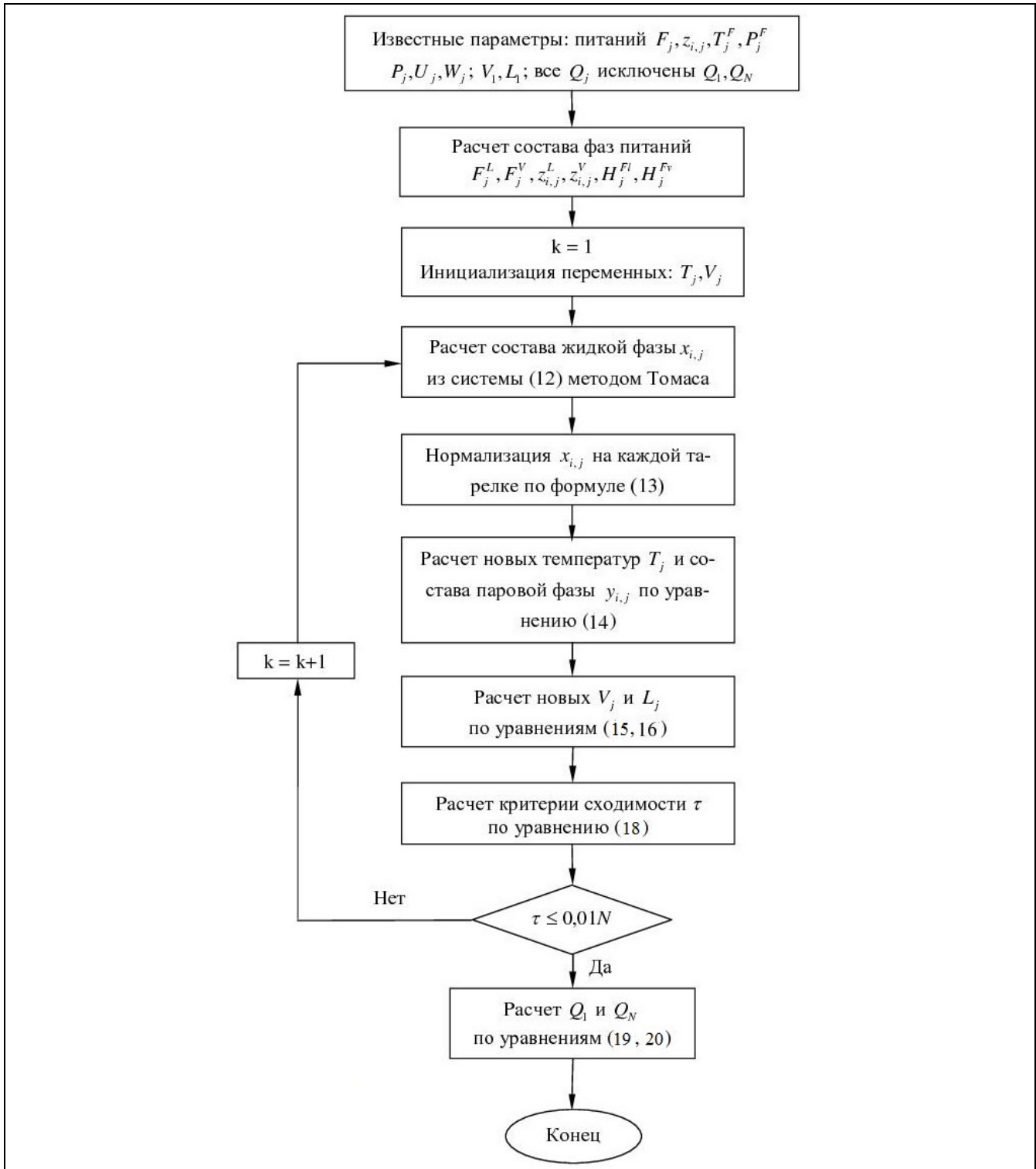


Рис. 2 - Блок-схема алгоритма расчета по методу независимого определения концентраций с использованием трехдиагональной матрицы

4. Поверочный пример алгоритма расчета по методу независимого определения концентраций с использованием трехдиагональной матрицы

В соответствии с алгоритмом была составлена программа расчета на языке Visual Basic.Net. На рис. 3 приведен пример поверочного расчета процесса ректификации смеси, состоящей из 5 компонентов: этана (1), пропана (2), н-бутана (3), н-пентана (4), н-гексана (5). Данные физических свойств этих компонентов взяты из работы [6]. В работе получены результаты: профиль L_j , V_j , T_j , $x_{i,j}$, $y_{i,j}$, а также Q_1 , Q_N (представлены в табл. 2). Данные табл. 2, находящиеся в скобках, представляют собой исходные данные. На рис. 4 представлен график профиля концентрации паровой фазы по высоте колонны.

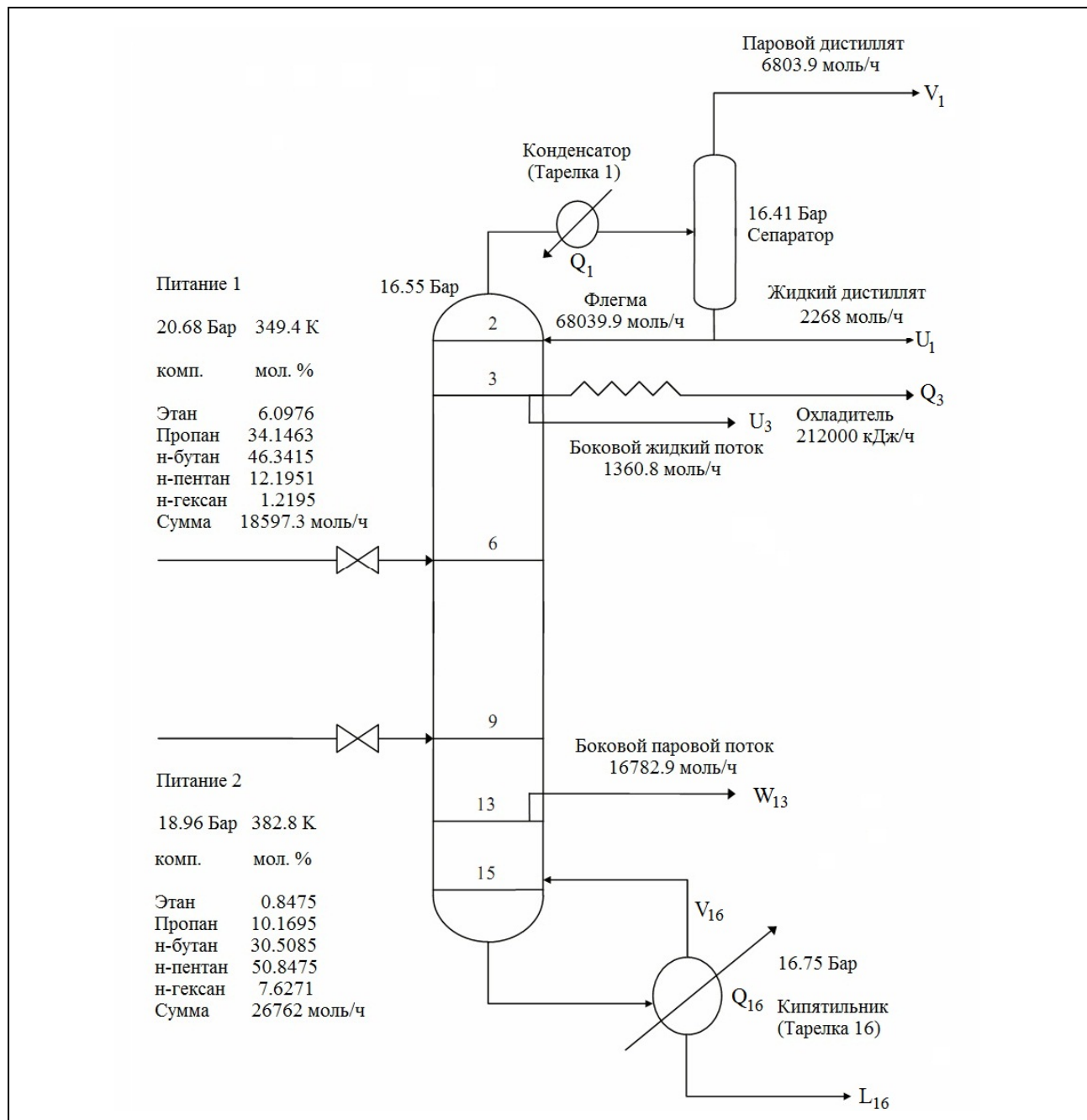


Рис. 3 - Поверочный пример алгоритма расчета по методу независимого определения концентраций с использованием трехдиагональной матрицы

Таблица 2 - Результаты расчета ($x_{i,j}, y_{i,j}$ в мольных долях)

Номер тарелок		L (моль/ч)		V (моль/ч)		T (К)		Q (КДж/ч)		U (моль/ч)		W (моль/ч)	
1		(68039,9)		(6803,9)		315,3		957733,5		(2268)		0	
3		77799,5		76125,8		327,5		(212000)		(1360,8)		0	
13		118356,8		84562,2		392,4		0		0		(16782,9)	
16		18143,6		96648,9		412,4		-1663362,3		0		0	
Номер тарелок	x_{1j}	y_{1j}	x_{2j}	y_{2j}	x_{3j}	y_{3j}	x_{4j}	y_{4j}	x_{5j}	y_{5j}			
1	0,0744	0,1719	0,8805	0,8116	0,0449	0,0165	0,0002	0,0000	0,0000	0,0000			
3	0,0182	0,0474	0,7801	0,8595	0,1982	0,0923	0,0035	0,0008	0,0000	0,0000			
13	0,0000	0,0001	0,0130	0,0291	0,5656	0,6901	0,3896	0,2694	0,0318	0,0113			
16	0,0000	0,0000	0,0013	0,0033	0,2595	0,3926	0,6248	0,5460	0,1144	0,0580			

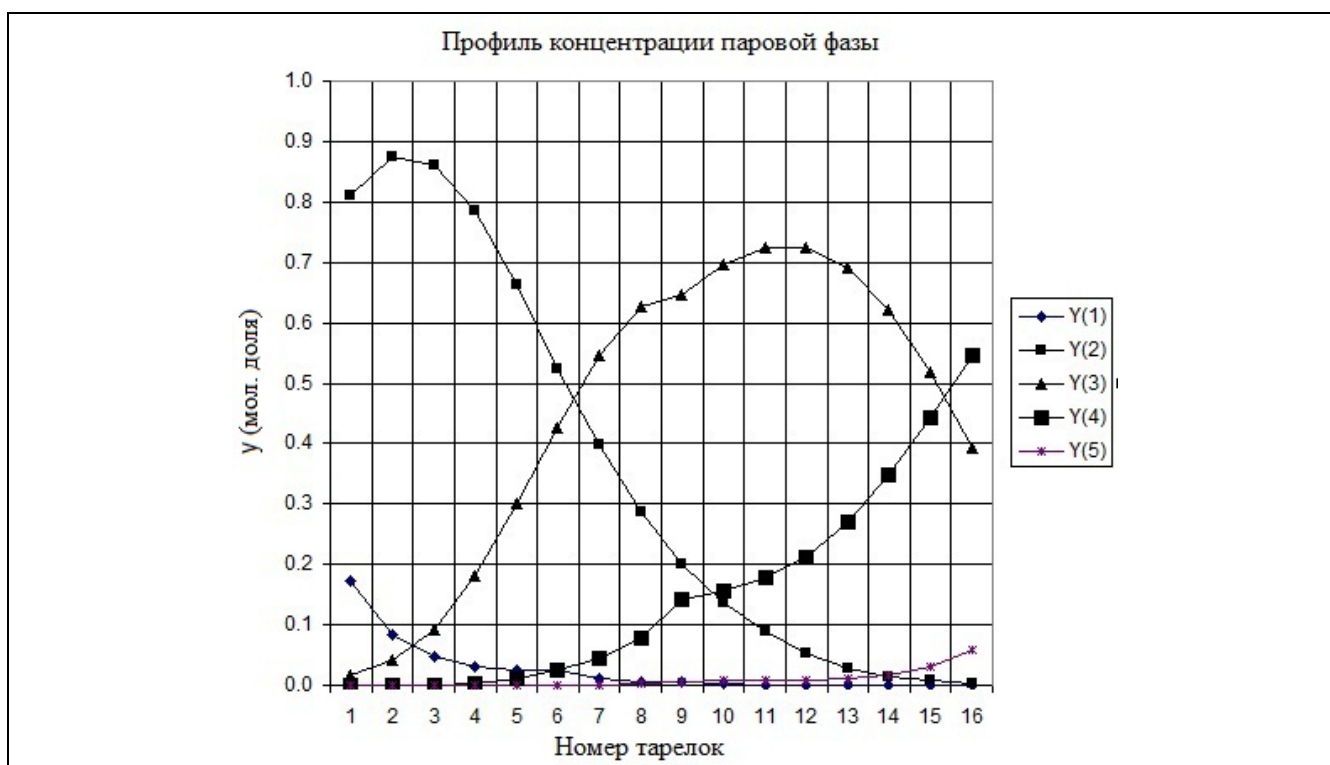


Рис. 4 - График профиля концентрации паровой фазы по высоте колонны

Вывод

Авторы предложили модификацию алгоритма расчета по методу независимого определения концентраций использованием трехдиагональной матрицы и программное обеспечение для моделирования и расчета многокомпонентной ректификации. Использование процедуры определения состава фаз, уравнения состояния СРК и модели Чао-Сидера для расчета коэффициента равновесия системы пар-жидкость, а также энтальпии фаз, позволяет применить этот алгоритм в программном обеспечении расчета колонны ректификации с различным питанием сырья и отбором жидкой и паровой фаз в разных точках колонны (рис.1).

Литература

1. *Кафаров, В.В.* Разделение многокомпонентных систем в химической технологии. Методы расчета: учебное пособие / В.В. Кафаров, Ю.Н. Ковалев, В.Н. Ветохин – М.: МХТИ. 1987. – 84 с.
2. *Комиссаров, Ю.А.* Научные основы процессов ректификации / Ю.А. Комиссаров, Л.С. Гордеев, Д.П. Вент. – М.: Химия. 2004. Т. 2. – 416 с.
3. *Ernest, J.* Equilibrium-Stage Separation Operations in Chemical Engineering / J. Ernest, Henley, J. D. Seader – New York: John Wiley & Sons Inc. 1981. – 742 pp.
4. *Rosendo, M.L.* Simulation of Multicomponent Multistage Vapor Liquid Separations. An Improved Algorithm Using the Wang Henke Tridiagonal Matrix Method / M. L. Rosendo – Ind. Eng. Chem. Res. 2003, 42, pp 175–182.
5. *Holland, C.D.* Fundamentals of multicomponent distillation / C.D. Holland. New York: McGraw-Hill Book Company. 1994. – 626 pp.
6. *Robert, C. R.* The Properties of Gases and Liquids / C. R. Robert, M. P. John, E. P. Bruce – New York: “McGraw– Hill, Inc”. 1987. – 741 pp.

© **Ю. А. Комиссаров** – д-р техн. наук, проф., зав. каф. электротехники и электроники РХТУ им. Д.И. Менделеева, marinanirhtu2009@rambler.ru; **Дам Куанг Шанг** – асп. той же кафедры.