

**Ю. А. Комиссаров, Л. С. Гордеев, Д. П. Вент**

# **ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ НАУЧНЫЕ ОСНОВЫ ПРОЦЕССОВ РЕКТИФИКАЦИИ**

## **Часть 2**

**УЧЕБНОЕ ПОСОБИЕ ДЛЯ СПО**

**2-е издание, переработанное и дополненное**

*Рекомендовано Учебно-методическим отделом среднего профессионального образования в качестве учебного пособия для студентов образовательных учреждений среднего профессионального образования*

**Книга доступна в электронной библиотеке [biblio-online.ru](http://biblio-online.ru),  
а также в мобильном приложении «Юрайт.Библиотека»**

**Москва ■ Юрайт ■ 2019**

УДК 66.048.3(075.32)

ББК 35.111я723

К63

**Авторы:**

**Комиссаров Юрий Алексеевич** — доктор технических наук, профессор, заслуженный работник высшей школы Российской Федерации, лауреат государственной премии Правительства Российской Федерации в области образования, профессор кафедры электротехники и электроники факультета инженерной химии Российского государственного химико-технологического университета имени Д. И. Менделеева;

**Гордеев Лев Сергеевич** — доктор технических наук, профессор, заслуженный деятель науки Российской Федерации, заслуженный химик СССР, Почетный профессор Российского государственного химико-технологического университета имени Д. И. Менделеева, дважды лауреат государственной премии Правительства Российской Федерации в области образования;

**Вент Дмитрий Павлович** — доктор технических наук, профессор, заслуженный работник высшей школы Российской Федерации, лауреат государственной премии Правительства Российской Федерации в области образования, заведующий кафедрой автоматизации производственных процессов факультета кибернетики Новомосковского института Российского государственного химико-технологического университета имени Д. И. Менделеева.

**Рецензенты:**

**Бояринов А. И.** — профессор, доктор технических наук, Профессор Российского химико-технологического университета имени Д. И. Менделеева;

**Писаренко Ю. А.** — доктор технических наук, профессор кафедры химии и технологии основного органического синтеза отделения наукоемких химических технологий Института тонких химических технологий имени М. В. Ломоносова Московского технологического университета.

**Комиссаров, Ю. А.**

К63

Химическая технология: научные основы процессов ректификации. В 2 ч. Часть 2 : учеб. пособие для СПО / Ю. А. Комиссаров, Л. С. Гордеев, Д. П. Вент. — 2-е изд., перераб. и доп. — М. : Издательство Юрайт, 2019. — 416 с. — (Серия : Профессиональное образование).

ISBN 978-5-534-10977-1 (ч. 2)

ISBN 978-5-534-10981-8

В настоящем издании рассматриваются основы процессов ректификации бинарных и многокомпонентных смесей, а также методы расчета совмещенных хеморектификационных процессов. Приводятся методы расчета фазового равновесия двух несмешивающихся жидкостей и пара, а также равновесия с учетом химической реакции.

Во второй части рассматриваются вопросы ректификации многокомпонентных смесей. Приводятся основные методы расчета вручную и с помощью современных методов математического моделирования с использованием ЭВМ.

Соответствует актуальным требованиям Федерального государственного образовательного стандарта среднего профессионального образования и профессиональным требованиям.

*Для студентов среднего профессионального образования, обучающихся по химико-технологическим специальностям.*

УДК 66.048.3(075.32)

ББК 35.111я723



Delphi Law Company

*Все права защищены. Никакая часть данной книги не может быть воспроизведена в какой бы то ни было форме без письменного разрешения владельцев авторских прав. Правовую поддержку издательства обеспечивает юридическая компания «Дельфи».*

ISBN 978-5-534-10977-1 (ч. 2)

ISBN 978-5-534-10981-8

© Комиссаров Ю. А., Вент Д. П., Гордеев Л. С., 2018

© ООО «Издательство Юрайт», 2019

## Оглавление

<b>Глава 5. Ректификация многокомпонентных систем.....</b>	<b>7</b>
5.1. Классификация многокомпонентных смесей .....	7
5.2. Задачи расчета и классификация их методов.....	8
5.3. Потарелочные методы расчета.....	8
5.4. Методы расчета, основанные на выборе ключевых компонентов .....	18
5.4.1. Метод Е. Джиллилянда .....	19
5.4.2. Метод С. Львова.....	24
5.4.3. Метод Б. Михайловского.....	29
5.5. Расчет ректификации многокомпонентных смесей на ЭВМ.....	39
5.5.1. Метод Тиле-Геддеса.....	42
5.5.2. Метод Ньютона .....	48
5.5.3. Метод Ньютона-Рафсона.....	50
5.5.4. Релаксационный метод расчета.....	58
<b>Глава 6. Расчет взаимосвязанных систем разделения с использованием методов гомотопии .....</b>	<b>66</b>
6.1. Анализ известных методов расчета.....	66
6.2. Математическое описание взаимосвязанных систем разделения .....	70
6.2.1. Решение задачи линеаризации системы уравнений взаимосвязанных колонн разделения .....	78
6.2.2. Алгоритм решения линеаризованной системы уравнений взаимосвязанных колонн разделения .....	82
6.3. Моделирование и оптимизация систем разделения с использованием методов гомотопии .....	86
6.4. Алгоритм выбора размера шага в процедуре интегрирования по методу дифференциальной гомотопии .....	104
6.5. Проверка эффективности методов гомотопии .....	110
<b>Глава 7. Равновесие многокомпонентных смесей для разных систем .....</b>	<b>117</b>
7.1. Расчет избыточной энергии Гиббса и коэффициентов активности .....	117
7.2. Учет неидеальности многокомпонентных смесей .....	128
7.2.1. Алгоритм расчета равновесия по уравнению Вильсона.....	131
7.2.2. Модель двух несмешивающихся жидкостей (НРТЛ).....	132

7.2.3. Быстрый метод расчета равновесия системы жидкость—жидкость .....	134
7.2.4. Проверка устойчивости жидкой фазы .....	139
7.3. Расчет равновесия в системе жидкость—жидкость—пар .....	141
7.4. Расчет многофазного равновесия с химическими реакциями .....	145
7.4.1. Система жидкость—жидкость—пар .....	145
7.4.2. Система с двумя жидкими фазами .....	148
7.4.3. Система жидкость — пар .....	150
7.5. Равновесие системы пар—жидкость при высоких давлениях .....	152
<b>Глава 8. Кинетика массопередачи многокомпонентных смесей .....</b>	<b>163</b>
8.1. Расчет коэффициентов массопередачи .....	163
8.2. Экспериментальное определение коэффициентов массопередачи в тройной смеси .....	166
<b>Глава 9. Синтез оптимальных схем ректификационных установок .....</b>	<b>168</b>
9.1. Выбор схемы разделения многокомпонентной смеси .....	171
9.2. Выбор схемы для разделения многокомпонентных смесей на отдельные фракции .....	174
9.3. Стратегия синтеза оптимальных схем разделения .....	182
9.3.1. Основные этапы проектирования схем разделения .....	182
9.3.2. Методы синтеза схем разделения .....	183
9.3.3. Алгоритм эвристического синтеза технологических схем разделения .....	185
9.3.4. Оценочные функции .....	186
9.3.5. Процедуры поиска в информационно-структурных методах синтеза .....	190
9.3.6. Методы эвристического синтеза .....	194
9.3.7. Метод динамического программирования .....	196
9.3.8. Метод ветвей и границ .....	198
9.3.9. Интегральный метод синтеза .....	202
9.4. Анализ тепловых потоков в схемах разделения .....	204
9.4.1. Формирование матрицы объединения тепловых потоков .....	207
9.5. Способы энергосбережения в ректификационных колоннах .....	211
9.5.1. Системы с рекуперацией тепла .....	212
9.5.2. Системы с обратимым смешением потоков и со связанными тепловыми потоками .....	217
9.5.3. Синтез схем разделения многокомпонентных систем с частично связанными тепловыми потоками .....	224

9.5.4. Системы с разделяющими агентами .....	229
9.5.5. Элементы и системы для разделения азеотропных смесей без разделяющих агентов .....	231
9.6. Синтез схем разделения с применением модификации метода ветвей и границ.....	234
9.6.1. Генерация вариантов схем разделения .....	236
9.6.2. Критерии эффективности алгоритмов синтеза .....	245
9.7. Пример синтеза схемы разделения алкибензолов в производстве кумола .....	246
9.7.1. Подготовка исходной информации .....	247
9.7.2. Генерация вариантов технологической схемы разделения алкибензолов .....	251
<b>Глава 10. Совмещенные реакционно-ректификационные процессы .....</b>	<b>260</b>
10.1. Общая классификация совмещенных процессов .....	260
10.2. Основные преимущества.....	261
10.3. Области возможного использования .....	262
10.4. Интенсификация массообменной и химической составляющих .....	263
10.5. Основные этапы разработки реакционно-ректификационных процессов.....	265
10.6. Математическая модель непрерывного реакционно-ректификационного процесса .....	269
10.6.1. Дифференциальные уравнения.....	277
10.6.2. Описание модели при бесконечном флегмовом и паровом числах .....	280
10.7. Моделирование и расчет хеморектификации при синтезе изопропилбензола.....	281
<b>Приложение 1. Решение систем алгебраических уравнений .....</b>	<b>302</b>
1. Основные определения.....	302
2. Матричные операции .....	309
3. Методы решения систем линейных алгебраических уравнений .....	317
4. Пример расчета тарельчатого абсорбера .....	329
5. Собственные значения и собственные векторы матриц в задачах химической технологии.....	331
6. Вычисление собственных значений и собственных векторов матриц .....	333
<b>Приложение 2. Интерполирование и аппроксимация .....</b>	<b>340</b>
1. Интерполирование.....	344
2. Аппроксимация .....	355

3. Примеры расчета параметров эмпирических зависимостей .....	372
4. Вычисление коэффициентов нелинейной зависимости по методу наименьших квадратов .....	376
<b>Приложение 3. Дифференциальные уравнения в задачах химической технологии .....</b>	<b>378</b>
<b>Рекомендуемая литература .....</b>	<b>413</b>
<b>Новые издания по дисциплине «Химическая технология» и смежным дисциплинам .....</b>	<b>416</b>

## Глава 5

### Ректификация многокомпонентных систем

Если теория и расчет процесса ректификации бинарных систем в настоящее время хорошо разработаны, то разработка теории и расчета ректификации многокомпонентных систем еще далека от завершения.

Следует при этом иметь в виду, что в практике перегонки имеются главным образом многокомпонентные системы, включающие большое количество компонентов. Так, при перегонке спирта-сырца в спиртовой промышленности перегоняемая система содержит свыше 40 компонентов; при ректификации жидкого воздуха в кислородной промышленности перегоняемая среда содержит также значительное количество компонентов; еще большее количество компонентов содержит нефть, перегоняемая в нефтеперерабатывающей промышленности.

Все это делает проблему, рассматриваемую в этой главе, особенно важной.

#### 5.1. Классификация многокомпонентных смесей

Многокомпонентные смеси, подвергаемые ректификации, могут быть разделены на две группы. К первой группе относятся смеси, подчиняющиеся законам Рауля и Генри. Эти смеси носят название *идеальных*.

Смеси, не подчиняющиеся законам Рауля и Генри, носят название *неидеальных*. К таким смесям относится, например, спирт-сырец. Если для первых систем (идеальных) возможно довольно точно подсчитать состав паровой фазы при заданных температуре и составе жидкой фазы, то для неидеальных смесей это невозможно. Состав паровой фазы может быть определен только экспериментально, что затрудняет расчет аппаратов для ректификации этих систем.

Вследствие этого метода расчета процесса ректификации многокомпонентных систем развивались главным образом для идеальных систем.

## 5.2. Задачи расчета и классификация их методов

При расчете процесса ректификации многокомпонентной системы следует определять:

- 1) число ступеней контакта фаз, необходимых для осуществления ректификации в заданных пределах;
- 2) минимальное флегмовое число;
- 3) распределение концентраций отдельных компонентов по тарелкам колонны;
- 4) места ввода питания в колонну;
- 5) расход тепла в колонне.

Решение этих задач позволит произвести оценку различных вариантов схем ректификационного процесса и выбрать оптимальный.

Существующие методы расчета ректификации многокомпонентных систем позволяют производить расчеты с различной степенью точности и могут быть классифицированы следующим образом:

- Методы расчета от тарелки к тарелке (потарелочные);
- Методы, основанные на сведениях многокомпонентной системы к бинарной. Эти методы являются приближенными и могут дать только ориентировочные результаты;
- Методы, основанные на выборе наиболее трудноразделяемой пары компонентов. Этот метод является как бы видоизменением предыдущего;
- Методы расчета на ЭВМ (Тиле-Геддеса, Ньютона-Рафсона, релаксации, комбинированные).

## 5.3. Потарелочные методы расчета

К этой группе относятся методы последовательного расчета состава фаз от тарелки к тарелке.

При этом принимается, что уравнения материальных балансов и уравнения рабочих линий, выведенных для бинарных систем, могут быть применены при рассмотрении движения каждого из компонентов сложной смеси.



Принимается также, что смесь является идеальной и что она подчиняется уравнениям Рауля и Генри.

Рассмотрим пример расчета по методу Льюиса и Матисона.

**Пример 1.** Рассчитать процесс ректификации смеси бензол – толуол – ксилол по следующим данным.

Питание содержит 60 мол.% бензола, 30 мол.% толуола и 10 мол.% ксилола. Остаток содержит 0,5 мол.% бензола и 74,4 мол.% толуола. Флегмовое число  $R$  равно 2. Ректификация производится при давлении 0,1 МПа. Расчет ведем на 100 кмоль питания.

*Решение.*

Материальный баланс для бензола будет иметь вид:

$$Fx_f = Dx_D + Wx_w; \quad 60 = Dx_D^6 + 0,005W =$$

$$= (100 - W)x_D^6 + 0,005W = 100x_D^6 + (0,005 - x_D^6)W$$

Принимая во внимание, что  $x_D^6 = 0,995$ , определим  $W$  и  $D$ :

$$W = 39,9 \text{ кмоль и } D = 60,1 \text{ кмоль,}$$

где  $D$ ,  $W$  – количество дистиллата и остатка, кмоль;  $x_D^6$  – мольная доля бензола в дистиллате.

По этим данным можно составить таблицу материального баланса:

Компоненты	Дистиллат		Остаток	
	$D$ , кмоль	$X_D$ , мол.%	$W$ , кмоль	$X_w$ , мол.%
Бензол	59,8	99,5	0,20	0,5
Толуол	0,3	0,5	29,7	74,4
Ксилол	0	-	10,0	25,1
Всего	60,1	100,0	39,9	100,0

Количество стекающей флегмы при  $R=2$  составляет:

$$\phi = D \cdot R = 2 \times 60,1 = 120,2 \text{ кмоль}$$

Количество паровой фазы в колонне:

$$G = \phi + D = 120,2 + 60,1 = 180,3 \text{ кмоль.}$$

Рассмотрим сначала движение компонентов смеси в колонне истощения.

Для бензола уравнение рабочей линии колонны истощения (1.52):

$$y = \frac{f+R}{R+1}x - \frac{f-1}{R+1}x_w,$$

где  $f = \frac{F}{D}$ .

Примем, что  $\frac{f+R}{R+1} = \frac{F}{G}$  представляет отношение количества (молей) жидкости, стекающей в колонне истощения, к количеству (молей) поднимающегося пара, а  $\frac{f-1}{R+1} = \frac{W}{G}$  — отношение количества (молей) кубового остатка к количеству (молей) пара, поднимающегося в нижней части колонны. Тогда уравнение рабочей линии для низа колонны:

$$y_m = \left(\frac{F}{G}\right)_m x_{m+1} - \left(\frac{W}{G}\right)_m x_w,$$

индекс  $m$  показывает, что рассматривается низ колонны (испаряющая часть).

В нашем случае для бензола запишем:

$$\begin{aligned} y_{m6} &= \left(\frac{F}{G}\right)_m x_{m6} - \left(\frac{W}{G}\right)_m x_{w6} = \\ &= \frac{220,2}{180,3} x_{m6} - \frac{39,9}{180,3} 0,005 = 1,221x_{m6} - 0,0011 \end{aligned}$$

Аналогично для толуола получим

$$y_{mт} = 1,221x_{mт} - 0,164$$

и для ксилола

$$y_{mk} = 1,221x_{mk} - 0,0555.$$

Пользуясь этим уравнением, начнем расчет с кубовой части колонны. Пользуясь законом Рауля, найдем состав пара, поднимающегося из куба. Для этого зададимся температурой кипения в кубе (115°C).

Воспользуемся графиком, изображенным на рис. 5.1 для составления таблицы (см. ниже). В этой таблице в соответствии с содержанием каждого из компонентов в кубовом остатке по уравнению  $p_i = P x_{wi}$  рассчитано его парциальное давление в паровой фазе кубовой части колонны. В последней графе представлены молярные доли компонентов в паровой фазе ( $y_{wi}$ ).

Необходимо повторить расчет, несколько повысив заданную температуру. Примем температуру равной 116°C и составим новую таблицу.

**Состав фаз для кубового остатка при  $t = 115^\circ\text{C}$**

Компоненты	$x_{wi}$ мол. доли	$P_i$ мм рт. ст.	$x_{wi}P_i$ мм рт. ст.	$y_w = \frac{x_{wi}P_i}{\sum x_{wi}P_i}$
Бензол	0,005	1990	10	0,0135
Толуол	0,744	850	632	0,845
Ксилол	0,251	390	98	0,1325

$$\sum x_{wi}P_i = 740 \text{ мм. рт. ст.}$$

Вычисленное давление паров при  $t=115^\circ\text{C}$  оказалось равным не 760, а 740 мм рт. ст.

**Состав фаз для кубового остатка при  $t = 116^\circ\text{C}$**

Компоненты	$x_{wi}$	$P_i$	$x_{wi}P_i$	$y_i$	$x_i$
Бензол	0,005	2000	10	0,0131	0,00116
Толуол	0,744	873	650	0,855	0,835
Ксилол	0,251	400	100,4	0,132	0,153

$$\sum x_{wi}P_i = 760,4 \text{ мм. рт. ст.}$$

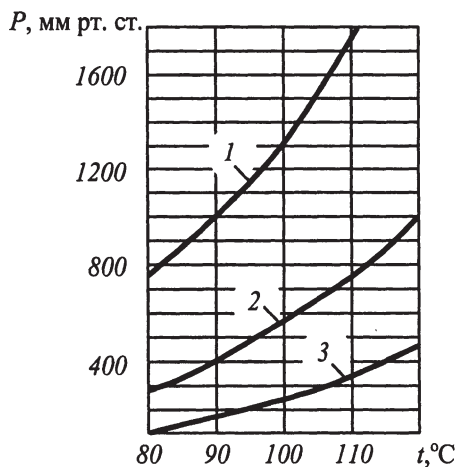


Рис. 5.1. Кривые упругости пара: 1 – бензола; 2 – толуола; 3 – ксилола

Сопоставляя обе таблицы (при 115 и 116°C), видим, что различие в составе паров незначительно и что, следовательно, можно было бы не повторять расчет. Опыт показывает, что сумма  $\sum xP$  может отклоняться от заданного давления на величину до 10% без заметного влияния на полученный в результате расчета состав пара.

Имея состав пара, поднимающегося из куба, можно определить состав жидкости на первой тарелке; для этого нужно воспользоваться уравнениями рабочих линий. Так, для бензола имеем:

$$y_{m6} = 1,221x_{m6} - 0,0011,$$

подставляя  $y_{m6}=0,0131$ , получим  $x_{16} = 0,0116$  мол. доли.

Аналогично найдем  $x_{1T}$  и  $x_{1K}$ .

Полученные значения запишем в таблицу.

Далее приступаем к определению состава пара, поднимающегося с первой тарелки на вторую.

Состав жидкости, кипящей на первой тарелке, известен. Чтобы найти состав пара по уравнению  $y_1=x_1P_1$ , найдем по диаграмме (рис. 5.1) давление паров чистых компонентов, задавшись температурой кипения, равной 115°C, и полученные результаты сведем в таблицу.

Содержание компонентов в паровой фазе вычисляем по формуле:

$$y_1 = \frac{x_i P_i}{\sum x_i P_i}$$

В этом уравнении в числителе стоит парциальное давление рассматриваемого компонента, а в знаменателе – общее давление смеси.

Полученная сумма  $\sum x_i P_i$  отличается от заданного давления (760 мм рт.ст.) на 31,8 мм рт.ст., т.е. примерно на 10 %. Поэтому пересчет не производим.

Найдя содержание компонентов в паровой фазе над первой тарелкой, определяем по уравнениям рабочих линий состав жидкости, кипящей на второй тарелке –  $x_2$ , заносим их в таблицу.

Затем рассчитываем составы фаз на второй тарелке, задаваясь температурой кипения на этой тарелке, равной 110°C.

Так как содержание компонентов в жидкой фазе девятой тарелки приблизительно то же, что и в питающей жидкости, то принимаем подачу питания на девятую тарелку. Если количество компонентов велико, то трудно добиться даже при многочисленных повторных расчетах совпадения расчетных и заданных для питания составов. В этом случае упрощают задачу, выбирая пару каких-либо компонентов, концентрации которых должны совпадать в задании и в результатах расчета. Эти компоненты получили название ключевых.

#### Составы фаз на первой тарелке при $t = 115^{\circ}\text{C}$

	$x_1$ , мол. доли	$P_1$ , мм рт. ст.	$x_1 P_1$ , мм рт. ст.	$y_1 = \frac{x_1 P_1}{\sum x_i P_i}$	$x_2$ , мол. доли
Бензол	0,0116	1990	23,1	0,0292	0,0248
Толуол	0,835	850	109	0,895	0,868
Ксилол	0,153	390	59,7	0,0755	0,1065
$\sum x_i P_i = 791,8$ мм рт. ст.					

#### Составы фаз на второй тарелке при $t = 110^{\circ}\text{C}$

Компоненты	$x_2$	$P_2$	$x_2 P_2$	$y_2$	$x_3$
Бензол	0,0248	1740	43	0,0597	0,0498
Толуол	0,868	740	642	0,892	0,865
Ксилол	0,1065	330	35	0,486	0,085
$\sum x_2 P_2 = 720$ мм рт. ст.					

#### Составы фаз на третьей тарелке

Компоненты	$x_3$	$P_3$	$x_3 P_3$	$y_3$	$x_4$
Бензол	0,0498	1740	86,7	0,115	0,095
Толуол	0,865	740	640	0,848	0,830
Ксилол	0,085	330	28	0,037	0,075
$\sum x_3 P_3 = 754,7$ мм рт. ст.					

#### Составы фаз на четвертой тарелке при $t = 110^{\circ}\text{C}$

Компоненты	$x_4$	$P_4$	$x_4 P_4$	$y_4$	$X_5$
Бензол	0,095	1740	165	0,205	0,169
Толуол	0,830	740	614	0,763	0,759
Ксилол	0,075	330	25	0,031	0,071
$\sum x_4 P_4 = 804$ мм рт. ст.					

**Составы фаз на пятой тарелке при  $t = 105^{\circ}\text{C}$**

Компоненты	$x_5$	$P_5$	$x_5 P_5$	$y_5$	$x_6$
Бензол	0,169	1020	257	0,336	0,276
Толуол	0,759	645	489	0,638	0,657
Ксилол	0,071	280	20	0,026	0,067

$$\sum x_5 P_5 = 766 \text{ мм рт. ст.}$$

**Составы фаз на шестой тарелке при  $t = 100^{\circ}\text{C}$**

Компоненты	$x_6$	$P_6$	$x_6 P_6$	$y_6$	$x_7$
Бензол	0,276	1300	359	0,49	0,402
Толуол	0,657	550	362	0,492	0,535
Ксилол	0,067	240	16,1	0,021	0,063

$$\sum x_6 P_6 = 737,1 \text{ мм рт. ст.}$$

**Составы фаз на седьмой тарелке при  $t = 95^{\circ}\text{C}$**

Компоненты	$x_7$	$P_7$	$x_7 P_7$	$y_7$	$x_8$
Бензол	0,402	1175	475	0,635	0,521
Толуол	0,535	490	262	0,35	0,420
Ксилол	0,063	200	12,6	0,017	0,059

$$\sum x_7 P_7 = 749,6 \text{ мм рт. ст.}$$

**Составы фаз на восьмой тарелке при  $t = 92,5^{\circ}\text{C}$**

Компоненты	$x_8$	$P_8$	$x_8 P_8$	$y_8$	$x_9$
Бензол	0,521	1080	563	0,74	0,605
Толуол	0,420	440	185	0,245	0,336
Ксилол	0,059	190	11,2	0,015	0,058

$$\sum x_8 P_8 = 769,2 \text{ мм рт. ст.}$$

Найдя номер тарелки питания, перейдем к колонне *обогащения*. Для этой части колонны справедливо уравнение

$$y_n = \frac{R}{R+1} x_{n+1} + \frac{x_D}{R+1};$$

индекс  $n$  указывает на то, что рассматривается колонна укрепления.

Отсюда для бензола имеем:

$$y_{n6} = \frac{2}{3} x_{n6} + \frac{1}{3} 0,995 = 0,667 x_{n6} + 0,333,$$

для толуола

$$y_{нт} = 0,667x_{нт} + 0,0017,$$

для ксилола

$$y_{нк} = 0,667x_{нк}$$

Расчет начинаем с тарелки питания, для которой найден состав кипящей жидкости. При этом порядок расчета остается тем же, что и для колонны истощения. Составляем таблицу для десятой тарелки (первой для колонны обогащения).

**Состав фаз на десятой тарелке при  $t = 90^\circ\text{C}$**

Компоненты	$x_9$	$P_9$	$x_9P_9$	$y_9$	$x_{10}$
Бензол	0,605	1000	605	0,81	0,712
Толуол	0,336	400	134	0,18	0,267
Ксилол	0,058	162,5	9,4	0,013	0,020

$$\sum x_9P_9 = 748,4 \text{ мм рт. ст.}$$

Для 11-й тарелки снизу.

**Состав фаз на 11-й тарелке при  $t = 87^\circ\text{C}$**

Компоненты	$x_{10}$	$P_{10}$	$x_{10}P_{10}$	$y_{10}$	$x_{11}$
Бензол	0,712	950	676	0,87	0,802
Толуол	0,267	360	96	0,125	0,189
Ксилол	0,020	150	3,0	0,004	0,006

$$\sum x_{10}P_{10} = 775,0 \text{ мм рт. ст.}$$

Продолжая составление таблиц в том же порядке, получим для 16-й тарелки состав пара  $y_6=0,9956$ ,  $y_7=0,044$ ,  $y_8=10^{-6}$  мол. доли.

Это приблизительно соответствует заданному составу дистиллата, и, следовательно, колонна обогащения должна иметь  $16 - 9 = 7$  ступеней разделения.

Покажем на примере той же смеси, как производится расчет при помощи уравнения

$$y_i = \frac{P_i}{P} x_i = K_i^\circ x_i,$$

где  $K_i^\circ = \frac{P_i}{P}$  — константа равновесия.

Возьмем, например, шестую тарелку колонны истощения. Жидкость, кипящая на этой тарелке, согласно предыдущему

расчету имеет следующий состав в мольных долях:  $x_6=0,169$ ,  $x_7=0,759$ ,  $x_8=0,071$ ; температуру кипения примем как и ранее  $100^\circ\text{C}$ .

Для бензола при этой температуре давление насыщенного пара равно 1320 мм рт. ст. Следовательно, константа равновесия

$$K_6^0 = \frac{1320}{760} = 1,745.$$

Соответственно при  $t=100^\circ\text{C}$  для толуола  $K_7^0 = 0,735$  и для ксилола  $K_8^0 = 0,316$ .

Теперь составим таблицу состава фаз для шестой тарелки.

Состав фаз на шестой тарелке при  $t=100^\circ\text{C}$

Компоненты	$x_6$	$K_6^0$	$x_6 K_6^0$	$y = \frac{x_6 K_6^0}{\sum x_6 K_6^0}$	$x_7$
Бензол	0,276	1,745	0,482	0,49	0,402
Толуол	0,657	0,735	0,482	0,49	0,535
Ксилол	0,067	0,316	0,021	0,021	0,063

$$\sum x_6 K_6^0 = 0,985 \text{ мм. рт. ст.}$$

Расчет проверяется по четвертой графе для  $xK^0$ ; величина  $\sum xK^0$  должна быть равна 1. Допускаемое отклонение  $\pm 10\%$ ; если же отклонение больше, то расчет следует повторить, изменив температуру. Уравнения рабочих линий остаются неизменными и используются для нахождения  $x_7$  так же, как это было изложено ранее.

### Расчет минимального флегмового числа

В расчете по потарелочному методу флегмовое число было равно 2. Однако было бы правильнее найти минимальное флегмовое число и, умножая его на коэффициент избытка, получить реальное флегмовое число.

Фенске предложил следующее уравнение для определения минимального флегмового числа при ректификации многокомпонентных систем:

$$R_{\min} = \frac{1}{\alpha - 1} \left( \frac{x_D^n}{x_f^n} - \frac{\alpha x_D^r}{x_f^r} \right).$$



В этом уравнении  $\alpha = \frac{P_1}{P_2}$  — относительная летучесть ключевых компонентов при температуре, установившейся в колонне.

Под ключевыми компонентами в этом случае понимают обычно ту пару компонентов сложной смеси, для которой относительная летучесть минимальна.  $x_D^n$  и  $x_f^n$  — концентрации легколетучего ключевого компонента в дистилляте и в исходной смеси в молярных долях;  $x_D^r$  и  $x_f^r$  — соответственно концентрации тяжелолетучего компонента в дистилляте и в исходной смеси.

Подсчитаем, пользуясь этой формулой, минимальное флегмовое число для случая ректификации смеси бензола, толуола и ксилола.

Примем за ключевые компоненты бензол и толуол. Температуру примем среднюю для колонны и равную  $\frac{115 + 85}{2} = 100^\circ \text{C}$ . Для этой температуры  $\alpha = \frac{1300}{550} = 2,4$ .

$$x_D^n = 0,995; \quad x_f^n = 0,60;$$

$$x_D^r = 0,005; \quad x_f^r = 0,30.$$

Отсюда

$$R_{min} = \frac{1}{2,4 - 1} \left( \frac{0,995}{0,60} - 2,4 \frac{0,005}{0,30} \right) = \frac{1}{1,4} (1,66 - 0,04) = 1,16.$$

Следовательно, при расчете процесса ректификации флегмовое число взято в 1,7 раз больше минимального. Уравнение Фенске выведено из предположения, что при  $R_{min}$  число тарелок бесконечно, а следовательно, на двух соседних тарелках составы жидкой фазы бесконечно близки. Это положение, справедливое для бинарных систем, не является точным для многокомпонентных систем. Поэтому, как указывает С. Львов, применение уравнения Фенске в случае расчета ректификации многокомпонентных систем не является обоснованным. Это обстоятельство привело к появлению ряда модифицированных уравнений для определения  $R_{min}$ . Однако все они имеют недостатки. Не касаясь здесь этого вопроса, отметим, что уравнение Фенске может быть применено только для ориентировочного выбора значений  $R_{min}$ . При этом не-

обходимо рассмотреть все возможные пары компонентов сложной смеси и взять максимальное значение  $R_{min}$ . В рассмотренном выше примере ключевые компоненты были выбраны правильно, так как другие две пары компонентов (толуол-ксилол, бензол-ксилол) дадут значения  $R_{min}$  меньшие единицы.

## 5.4. Методы расчета, основанные на выборе ключевых компонентов

Эти методы основаны на замене сложной многокомпонентной системы бинарной. Например, имеем многокомпонентную систему, состоящую из компонентов  $A$ ,  $B$ ,  $C$  и  $D$ . Разделим эту смесь на две части, отнеся к первой легколетучий компонент  $A$ , а другие три тяжелолетучих компонента ко второй,  $B_1 = B + C + D$ .

Построив кривую равновесия для  $A$  и  $B_1$ , ведем расчет так, как будто имеем бинарную смесь, содержащую  $A$  кг первого компонента и  $B_1$  кг второго.

Пусть, например, имеется смесь, содержащая 54% бензола, 11% толуола, 9% ксилола, 8% сольвента и 18% остатка. Заменяем эту смесь при расчете бинарной, содержащей бензол и толуол. При этом количество толуола будет принято равным 46%. Это позволит ориентировочно определить число тарелок, необходимых для перегонки смеси при заданном флегмовом числе. Следует иметь в виду, что этот метод игнорирует правило фаз, так как принимает бинарную смесь за многокомпонентную, обладающую многими степенями свободы. Кроме того, он не позволяет судить о распределении компонентов сложной смеси по тарелкам колонны. Однако в некоторых случаях такая замена неизбежна и получила применение в технике.

Так, например, при расчете ректификационных аппаратов в спиртовой промышленности сложные смеси, содержащие более 40 компонентов, сводят к бинарной смеси этиловый спирт–вода. Это до некоторой степени обосновывается тем, что вода и этиловый спирт составляют по количеству свыше 99%. Поэтому присутствующие в системе примеси не оказывают решающего влияния на равновесие в этой системе. Однако такая замена не позволяет предсказать распределение примесей в колонне.

Метод сведения многокомпонентной системы к бинарной иногда употребляется и в другой модификации. Разделяя компоненты на две группы, вычисляют в каждой группе среднюю летучесть (упругость пара). Затем по вычисленным упругостям паров строят линии равновесия и ведут расчет, как для бинарной системы. Этот метод не более обоснован, чем изложенный выше, но зато более громоздок и не может быть рекомендован для расчета.

#### 5.4.1. Метод Е. Джиллиленда

В основу метода, предложенного Е. Джиллилендом, положена замена сложной многокомпонентной системы бинарной системой, состоящей из двух компонентов, получивших название ключевых. Один из этих компонентов именуется легким, другой – тяжелым. Легким компонентом выбирается компонент, имеющий наибольшую упругость паров. Содержание его в истощенной жидкости в незначительном количестве допустимо и определяется технологическими требованиями. Тяжелым выбирается компонент с малой упругостью пара. Его содержание в дистилляте также определяется технологическими требованиями.

Если обозначить упругость пара легкого компонента при средней температуре в колонне через  $P_1$ , а тяжелого  $P_2$ , то относительная летучесть их  $\varepsilon$  будет:

$$\varepsilon = \frac{P_1}{P_2}$$

Если колонна работает при бесконечном флегмовом числе ( $R = \infty$ ), то количество тарелок, необходимых для осуществления перегонки, может быть определено из уравнения

$$N_{min} + 1 = \frac{\lg \frac{x_D^n x_W^T}{x_D^T x_W^n}}{\lg \varepsilon} \quad (5.1)$$

В этом уравнении  $x_D^n, x_D^T$  – содержание легкого, тяжелого компонентов в дистилляте, в мольн. долях;  $x_W^n$  и  $x_W^T$  – соответственно в остатке (кубе).

Уравнение (5.1) позволяет определить минимальное число тарелок, если задано содержание легкого и тяжелого компонентов в дистилляте и в остатке, оно пригодно в том случае, когда дефлегматор не производит укрепляющего действия. Если же

дефлегматор производит укрепление, эквивалентное одной тарелке, левую часть уравнения следует записать как  $N + 2$ .

Для ориентировочного определения числа тарелок при конечном флегмовом числе  $R$  Е. Джиллилянд предложил диаграмму (рис. 5.2). На оси ординат диаграммы отложена величина

$$\frac{N - N_{min}}{1 + N}, \text{ а на оси абсцисс } \frac{R - R_{min}}{R + 1}.$$

Для приближенного нахождения минимального флегмового числа предложена следующая формула:

$$R_{min} + 1 = M(T + S + R_0) \quad (5.2)$$

Эта формула применима в том случае ректификации, когда питание поступает при температуре кипения, а количество пара в колонне укрепления и истощения одинаково.

Величины, входящие в уравнение (5.2), определяются по формулам:

$$M = \frac{x_D^n}{x_W^n} \cdot \left( \frac{x_f^n}{x_f^r} \right)^{-1} - \frac{x_D^r}{x_W^r}, \quad (5.3)$$

где  $x_f^n$  и  $x_f^r$  — содержание легкого и тяжелого компонентов в питании в мольных долях.

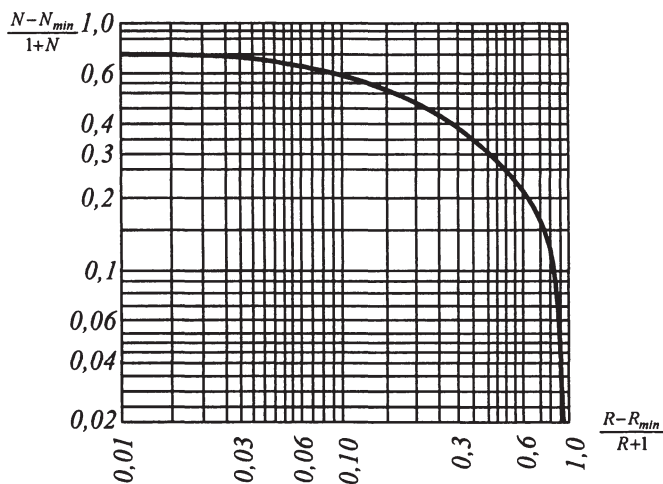


Рис. 5.2. Диаграмма Е. Джиллилянда

$$T = \left( 1 - \varepsilon \frac{x_f^n}{x_f^r} \right) \frac{x_W^r}{\varepsilon - 1}, \quad (5.4)$$

где  $\varepsilon$  – отношение летучести легкого компонента к летучести тяжелого.

Делается допущение, что величина  $\varepsilon$  остается постоянной по всей высоте колонны.

$$S = \sum \frac{\varepsilon'' x_W''}{\varepsilon - \varepsilon''}, \quad (5.5)$$

где  $\varepsilon''$  – относительная летучесть компонентов, менее летучих, чем тяжелый ключевой компонент;  $x_W''$  – содержание этих компонентов в исходной жидкости в мольных долях;

$$R_0 = \frac{D}{W} \sum \frac{\varepsilon' x_D^0}{\varepsilon' - 1}, \quad (5.6)$$

где  $D$ ,  $W$  – количество дистиллята и остатка в кмоль;  $\varepsilon'$  – относительные летучести по отношению к тяжелому ключевому компоненту, т.е. компонентов более летучих, чем легкий ключевой компонент;  $x_D^0$  – содержание этих компонентов в дистилляте.

Применение метода Е. Джиллиленда проиллюстрируем при помощи примера.

**Пример 2.** Имеется смесь бензола, толуола и ксилола. Каждый из компонентов составляет 33,3 мол.% Дистиллят содержит 2 мол.% толуола и не содержит ксилола. Остаток содержит 2 мол.% бензола.  $R=1,5R_{min}$ . Дефлегматор не производит укрепляющего действия. Количество исходной смеси 100 кмоль. Летучесть бензола по толуолу  $\varepsilon_6 = 2,5$ ; ксилола по толуолу  $\varepsilon_k = 0,45$ .

**Решение.** Выбираем за легкий ключевой компонент – бензол, за тяжелый – толуол.

В дистилляте согласно условию содержится в мольных долях:

$$x_{D6} = 0,98; \quad x_{DT} = 0,02; \quad x_{Dk} = 0.$$

В исходной жидкости

$$x_{m6} = 0,333; \quad x_{mT} = 0,333; \quad x_{mk} = 0,333.$$

Для нахождения количества дистиллята составим уравнение баланса для бензола

$$100 \cdot 0,333 = 0,98 \cdot D + 0,02(100 - D); \quad D = 32,6 \text{ кмоль},$$

$$W = 100 - D = 67,4 \text{ кмоль.}$$

Составим уравнение баланса в остатке для толуола:

$$100 \cdot 0,333 = 0,02D + x_{WT}(100 - D) = 0,02 \cdot 32,6 + x_{WT} 67,4,$$

откуда

$$x_{WT} = 0,485 \text{ мольн. доли.}$$

Мольная доля ксилола в остатке:

$$100 \cdot 0,333 = x_{WK}(100 - D) = x_{WK} 67,4.$$

Таким образом, состав остатка в мольных долях:

$$x_{WB} = 0,02; \quad x_{WT} = 0,485; \quad x_{WK} = 0,495.$$

По уравнению (5.1) находим  $N_{min}$ :

$$N_{min} + 1 = \frac{\lg \frac{0,98}{0,02} \cdot \frac{0,485}{0,02}}{\lg 2,5} = 7,7,$$

откуда

$$N_{min} = 6,7.$$

Найдем далее значение  $R_{min}$  по уравнению (5.2), определив первоначально вспомогательные величины: из уравнения (5.3)

$$M = \frac{\frac{0,98}{0,33}}{\frac{0,485}{0,33}} = \frac{0,02}{0,485} = 1,98;$$

из уравнения (5.4)

$$T = \left( 1 + 2,5 \frac{0,33}{0,33} \right) \frac{0,485}{2,5 - 1} = 1,13;$$

из уравнения (5.5)

$$S = \frac{0,45 \cdot 0,495}{2,5 - 0,45} = 0,109$$

Величина  $R_0$  будет равна нулю, так как в системе нет компонентов более летучих, чем бензол (легкий ключевой компонент).

Теперь из уравнения (5.2) находим  $R_{min}$ :

$$R_{min} + 1 = 1,98 (1,13 + 0,109) = 2,46;$$

$$R_{min} = 1,46;$$

$$R = 1,5 \cdot 2,46 = 2,19.$$

Находим далее

$$\frac{R - R_{min}}{R + 1} = \frac{2,19 - 1,46}{2,19 + 1} = 0,23.$$

Воспользовавшись диаграммой (рис. 5.2), найдем

$$\frac{N - N_{min}}{N + 1} = 0,4.$$

Так как  $N_{min} = 6,7$ , то  $N = 11,8$  тарелок (12 тарелок).

Формула (5.1) может быть использована также для нахождения минимального числа теоретических тарелок в укрепляющей и истощающей частях колонны. Для укрепляющей части колонны уравнение (5.1) будет иметь вид:

$$N_{min} = \frac{\lg \left( \frac{x_D^n \cdot x_F^T}{x_D^T \cdot x_F^n} \right)}{\lg \varepsilon};$$

для истощающей части колонны

$$N_{min} = \frac{\lg \left( \frac{x_F^n \cdot x_W^T}{x_F^T \cdot x_W^n} \right)}{\lg \varepsilon}$$

Для нашего примера найдем:

$$N_{min} = \frac{\lg \left( \frac{0,98 \cdot 0,333}{0,02 \cdot 0,333} \right)}{2,5} \cong 4,2.$$

Находим значение  $N$  из уравнения

$$\frac{N - N_{min}}{N + 1} = 0,4,$$

отсюда  $N = 7,8$  ( $\sim 8$  тарелок).

Следовательно, питание должно быть подано на четвертую (считая снизу) тарелку.

#### **5.4.2. Метод С. Львова**

Этот метод предлагается для любых многокомпонентных систем, как для идеальных, так и неидеальных. Основные положения метода формулируются следующим образом:

- Процесс ректификации любой многокомпонентной смеси является в действительности совокупностью нескольких вполне определенных для заданного разделения процессов ректификации отдельных пар компонентов. Эти процессы протекают совместно с неодинаковой степенью трудности разделения.

- Любая разделяемая пара компонентов может рассматриваться как бинарная смесь, если влияние других присутствующих компонентов на равновесные соотношения рассматриваемой пары учтено для тех условий, при которых будет проведен процесс ректификации.

- Среди каждой такой совокупности разделяемых пар всегда имеются наиболее трудные в разделении пары, определяющие все заданное разделение.

Согласно этим положениям для проведения расчета необходимо иметь кривые фазового равновесия разделяемых пар компонентов, найденные в реальных условиях процесса ректификации многокомпонентных систем. Такие кривые равновесия должны быть получены экспериментально. Методика получения таких кривых разработана Л. Серафимовым.

Кривые равновесия снимались на лабораторных ректификационных установках непрерывного действия. Колонны имели 14, 22 и 36 одноколпачковых тарелок диаметром соответственно 60, 70 и 40 мм. Тарелки снабжались пробоотборниками, отбирающими одновременно пробы жидкости для анализа. Колонны тщательно изолировались для предотвращения конденсации на стенках колонны.

После 5-8 ч непрерывной работы из колонны отбирались пробы. При этом возможны два варианта. По первому варианту из колонны отбирается только жидкая фаза. В результате получается состав жидкой и паровой фаз.



По другому варианту одновременно отбираются пробы как жидкой, так и паровой фазы. По составу фаз получают данные для построения кривой равновесия.

Кривые равновесия строятся как обычные кривые равновесия бинарных систем. На горизонтальной оси откладывается содержание низкокипящих компонентов в жидкой фазе, а на вертикальной – в паровой.

Сопоставление кривых равновесия, полученное для различных пар, дает возможность выделить наиболее трудно разделяемую пару.

Опыты Л. Серафимова показали, что:

- при любом изменении флегмового числа кривые фазового равновесия разделяемых пар остаются неизменными;
- изменение состава исходной смеси существенно изменяет кривые фазового равновесия разделяемых пар.

Последнее обстоятельство делает предлагаемый метод неприемлемым при изменении состава питания. Однако следует иметь в виду, что в промышленных установках состав питания обычно остается постоянным.

На рис. 5.3 представлены кривые равновесия системы ацетон – этанол в присутствии метанола. На оси абсцисс отложены проценты ацетона по отношению к сумме ацетона и этанола в жидкой фазе. На оси ординат – то же в паровой фазе.

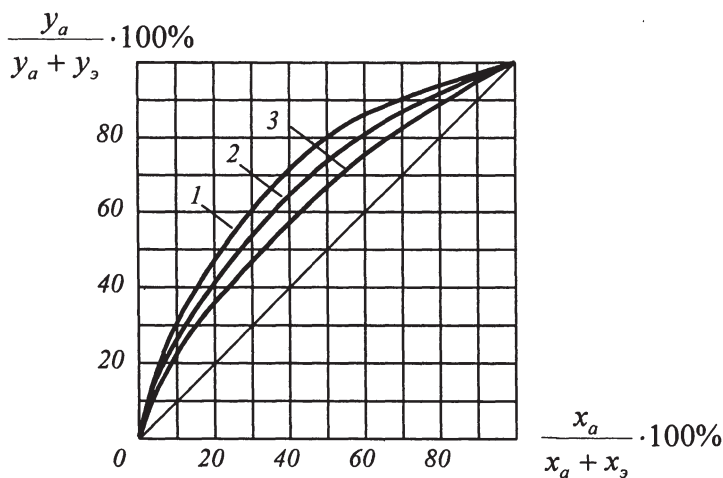


Рис. 5.3. Кривые равновесия системы ацетон – этанол в присутствии метанола

Кривая 1 построена для случая, когда питание содержало 20,3 мас.% ацетона, 51 мас.% метанола и 28,7 мас.% этанола; кривая 2 – для случая, когда питание содержало 20 мас.% ацетона, 10 мас.% метанола, 70 мас.% этанола; кривая 3 – для случая, когда питание содержало 49 мас.% ацетона, 2 мас.% метанола и 49 мас.% этанола.

Таким образом, положение кривой равновесия рассматриваемых компонентов зависит от состава питания.

Однако, как показали опыты, положение кривых равновесия не изменяется при изменении флегмового числа в широких пределах (от 2,7 до  $\infty$ )

Что касается идеальных смесей, то кривая их равновесия ( $y^*$ ) может быть найдена аналитически при помощи уравнения

$$y^* = \frac{\alpha_{B-D} x}{(\alpha_{B-D} - 1)x + 1}, \quad (5.7)$$

где  $\alpha_{B-D}$  – относительная летучесть компонентов  $B$  и  $D$ ;  $x$  – содержание легколетучего компонента  $B$  в жидкости.

Уравнение (5.7) выведено следующим образом: компоненты  $A, B, C, D$  ранжированы в ряд по их летучести, при этом компонент  $A$  наиболее летучий; содержание их в жидкой фазе в кмоль соответственно равно  $x_a, x_b, x_c, x_d$ ; константы фазового равновесия для каждого компонента при заданной температуре равны  $K_a, K_b, K_c, K_D$ ; равновесные мольные концентрации в паровой фазе  $y_a^*, y_b^*, y_c^*, y_d^*$ .

Для какой-то произвольной пары компонентов, например,  $B$  и  $D$ , можно написать

$$y_b^* = K_B \frac{x_b}{x_a + x_b + x_c + x_d} \quad \text{и} \quad y_d^* = K_D \frac{x_d}{x_a + x_b + x_c + x_d},$$

отсюда

$$\frac{y_b^*}{y_d^*} = \frac{K_B}{K_D} \cdot \frac{x_b}{x_d}$$

Для перехода к относительным концентрациям делим числитель и знаменатель левой части уравнения на сумму  $(y_b + y_d)$ , а правой на сумму  $(x_b + x_d)$

$$\frac{\frac{y_b^*}{y_b^* + y_d^*}}{\frac{y_d^*}{y_b^* + y_d^*}} = \frac{K_B}{K_D} \cdot \frac{\frac{x_b}{x_b + x_d}}{\frac{x_d}{x_b + x_d}}$$

или

$$\frac{\frac{y_b^*}{y_b^* + y_d^*}}{1 - \frac{y_d^*}{y_b^* + y_d^*}} = \frac{K_B}{K_D} \cdot \frac{\frac{x_b}{x_b + x_d}}{1 - \frac{x_b}{x_b + x_d}}$$

Обозначим через  $y$  – содержание легколетучего компонента пары  $B$  и  $D$  в паровой фазе в мольных долях;  $x$  – то же в жидкой фазе;  $\frac{K_B}{K_D} = \alpha_{B-D}$  – относительная летучесть компонентов рассматриваемой пары.

Сопоставляя написанные выше уравнения, получим:

$$\frac{y}{1-y} = \alpha_{B-D} \frac{x}{1-x},$$

а решая эти уравнения относительно  $y$ , получим уравнение (5.7).

В этом уравнении равновесие дано только для данной пары независимо от содержания других компонентов. Это показывает, что для данной пары компонентов идеальной смеси все прочие пары являются только разбавителем.

Покажем на примере, как применяется метод Львова для расчета ректификации идеальных смесей.

**Пример 3.** Найти число тарелок колонны для ректификации смеси, содержащей 60 мол.% бензола, 30 мол.% толуола, 10 мол.% ксилола; дистиллят содержит 99,5 мол.% бензола и 0,5 мол.% толуола; остаток содержит бензола 0,5 мол.%, толуола 74,5 мол.%, ксилола 25,1 мол.% Рабочее давление атмосферное. Температуры кипения в кубе и в верхней части колонны могут быть найдены путем подбора. Температура кипения в кубе окажется при заданном составе равной 116°C, а в верхней части колонны 80°C. Примем, что исходная смесь поступает при температуре кипения.

**Решение.** В рассматриваемой смеси возможны следующие пары: бензол-толуол (бт), бензол-ксилол (бк), толуол-ксилол

(тк); за определяющую пару примем пару бт. Находим уравнение кривой равновесия:

$$y^* = \frac{\alpha_{6\tau} x}{(\alpha_{6\tau} - 1)x + 1}$$

$$\alpha_{6\tau} = \frac{\alpha_{80} + \alpha_{116}}{2} = \frac{\left(\frac{P_6}{P_\tau}\right)_{80} + \left(\frac{P_6}{P_\tau}\right)_{116}}{2} = \frac{2,6 + 2,3}{2} = 2,45.$$

Отсюда

$$y^* = \frac{2,45x}{1,45x + 1}.$$

Минимальное флегмовое число для определяющей пары бензол-толуол находится по уравнению:

$$R_{min} = \frac{x_D - y_f^*}{y_f^* - x_f},$$

где  $x_D$  – содержание легколетучего компонента (пары бензол-толуол) в дистилляте;  $x_f$  – то же в исходной смеси;  $y_f^*$  – то же в паровой фазе, равновесной с питанием.

$$x_D = \frac{99,5}{99,5 + 0,5} = 0,995; \quad x_f = \frac{60}{60 + 30} = 0,667.$$

По выведенному ранее уравнению

$$y_f^* = \frac{2,45 \cdot 0,667}{1,45 \cdot 0,667 + 1} = 0,835,$$

тогда

$$R_{min} = 0,95.$$

Реальное флегмовое число примем равным 2.

Уравнение рабочей линии верха колонны запишем, как для бинарной смеси:

$$y = \frac{R}{R+1} x + \frac{x_D}{R+1} = 0,667x + 0,332.$$

Определенное по этому методу число тарелок будет равно 16.

Повторив ту же операцию с парами бк и тк, находим, что количество необходимых тарелок меньше. Следовательно, нужно принять данные, полученные для пары бт.

Метод Львова дает возможность определить минимум флегмы и число тарелок. Однако он не позволяет определить концентрации компонентов на каждой тарелке.

### 5.4.3. Метод Б. Михайловского

Ступенчатый метод расчета ректификации многокомпонентных систем, описанный выше, является наиболее точным. Однако этот метод трудоемок. Поэтому неоднократно предпринимались попытки разработать приближенный аналитический метод расчета ректификации многокомпонентных систем. Один из таких методов предложен Б. Михайловским. Этот метод предназначен для расчета ректификации смесей, состоящих из любого числа компонентов, подчиняющихся законам Рауля и Дальтона.

Целью расчета является определение:

- минимального флегмового числа;
- числа теоретических тарелок;
- состава дистиллята в остатке.

Основным допущением при расчете является то, что можно пользоваться любой парой компонентов, учитывая при этом влияние других компонентов смеси.

Если компоненты сложной смеси проранжировать в порядке увеличения летучести, то будем иметь: 1, 2, 3, ...,  $k-2$ ,  $k-1$ ,  $k$  компонентов. В дальнейшем за определяющую пару берутся наиболее летучие компоненты  $k-1$  и  $k$ .

Расчет предлагается для колонны, состоящей из истощающей и укрепляющей частей.

В задании для расчета дается количество исходной смеси в молях и состав исходной смеси в мольных долях. Обозначим концентрацию компонентов смеси через  $x_{1f}$ ,  $x_{2f}$ ,  $x_{3f}$ , ...,  $x_{kf}$ .

Очевидно,

$$x_{1f} + x_{2f} + x_{3f} + \dots + x_{kf} = 1.$$

Кроме того, на основании технологических данных принимаются концентрации наиболее летучего компонента в дистилляте  $x_{k,D}$  и в кубовом остатке  $x_{k,W}$ . Концентрации прочих компонентов не могут быть взяты произвольно и вычисляются.

Давление в колонне  $P$  принимается исходя из технологических требований.

Температура кипения питания  $t_f$  определяется экспери-

ментально. Кроме того, она может быть определена расчетным путем по уравнению

$$P = x_{1,f}P_1 + x_{2,f}P_2 + x_{3,f}P_3 + \dots + x_{k,f}P_k$$

где  $P_1, P_2, P_3, \dots, P_k$  — упругости паров чистых компонентов при температуре исходной смеси  $t_f$

Задавая температуру  $t_f$ , находят по справочникам значения  $P_1, P_2, \dots, P_k$  и подставляют найденные значения в уравнение. Если давление в колонне  $P$  совпадет с расчетным, то принятое значение  $t_f$  выбрано правильно. Если равенство не будет иметь место, то принимают другое значение  $t_f$  и повторяют расчет.

Для расчета по методу Михайловского необходимо также знать относительные летучести компонентов смеси. При этом делается допущение, что средняя относительная летучесть компонентов смеси равняется летучести при температуре кипения  $t_f$ .

Относительная летучесть определяется по отношению к наименее летучему компоненту. Обозначим летучесть этого компонента  $\alpha_1$ . Очевидно, что

$$\alpha_1 = 1; \alpha_2 = \frac{P_2}{P_1}; \alpha_3 = \frac{P_3}{P_1}; \alpha_{k-1} = \frac{P_{k-1}}{P_1}; \alpha_k = \frac{P_k}{P_1}.$$

Летучесть наиболее летучего компонента, отнесенная к летучести других компонентов, обозначается  $\beta$ :

$$\beta_1 = \frac{P_k}{P_1}; \beta_2 = \frac{P_k}{P_2}; \beta_3 = \frac{P_k}{P_3}; \dots; \beta_{(k-1)} = \frac{P_k}{P_{(k-1)}}; \beta_k = \frac{P_k}{P_k} = 1.$$

При принятых допущениях и обозначениях Михайловский вывел следующие расчетные уравнения:

1. Расчет количества дистиллата  $D$  и кубового остатка  $W$ :

$$D = F \left( \frac{x_{k,F} - x_{k,W}}{x_{k,D} - x_{k,W}} \right) \text{ и } W = F - D.$$

Здесь и в дальнейшем индексы при концентрациях поставлены так, что первый из них обозначает номер компонента, а второй продукт, в котором определяется концентрация этого компонента. Таким образом, индекс  $k, D$  означает, что речь идет о компоненте  $k$  в дистиллате;  $k, W$  — о компоненте  $k$  в остатке;  $k, f$  — в питании.

## 2. Расчет концентрации компонента в дистиллате.

$$x_{1,D} + x_{2,D} + \dots + x_{(k-1),D} + x_{k,D} = 1; \quad (5.8)$$

$x_{k,D}$  задается, поэтому

$$x_{1,D} + x_{2,D} + x_{3,D} + \dots + x_{(k-1),D} + x_{k,D} = 1 - x_{k,D}.$$

В этом уравнении

$$x_{1,D} = \frac{x_{k,D} Fx_{1,f}}{Dx_{k,D} + Wx_{k,W} \beta_1^{N_0+1}}; \quad x_{2,D} = \frac{x_{k,D} Fx_{2,f}}{Dx_{k,D} + Wx_{k,f} \beta_2^{N_0+1}}; \quad (5.9)$$

$$x_{(k-1),D} = \frac{x_{k,D} Fx_{(k-1),f}}{Dx_{k,D} + Wx_{k,f} \beta_{k-1}^{N_0+1}};$$

3. Расчет минимального числа ступеней ( $N_0$ ). Подставляя значения  $x$  из уравнения (5.9) в уравнение (5.8), получим

$$\frac{Fx_{k,D} x_{1,f}}{Dx_{k,D} + \beta_1^{N_0+1}} + \frac{Fx_{k,D} x_{2,f}}{Dx_{k,D} + \beta_2^{N_0+1}} + \dots + \frac{Fx_{k,D} x_{(k-1),f}}{Dx_{k,D} + Wx_{k,W} \beta_{(k-1)}^{N_0-1}} = 1 - x_{k,D}, \quad (5.10)$$

где  $N_0$  – минимальное число ступеней, соответствующее бесконечно большому значению флегмового числа  $R_\infty$ .

Из уравнения (5.10)  $N_0$  определяется численными методами (Приложение 1).

## 4. Расчет концентрации компонентов в кубовом остатке.

$$x_{1,W} = \frac{Fx_{1,f} - Dx_{1,D}}{W}$$

$$x_{2,W} = \frac{Fx_{2,f} - Dx_{2,D}}{W} \quad (5.11)$$

$$x_{(k-1),W} = \frac{Fx_{(k-1),f} - Dx_{(k-1),D}}{W}$$

$$x_{1,W} + x_{2,W} + \dots + x_{(k-1),W} + x_{k,W} = 1$$

## 5. Расчет минимального флегмового числа $R_{min}$ .

$$R_{min} = \frac{x_{1,D}}{1-T} + \frac{\alpha_2 x_{2,D}}{\alpha_2 - T} + \frac{\alpha_3 x_{3,D}}{\alpha_3 - T} + \dots + \frac{\alpha_k x_{k,D}}{\alpha_k - T} - 1 \quad (5.12)$$

Величина  $T$  находится численными методами из уравнения:

$$\frac{x_{1,f}}{1-T} + \frac{\alpha_2 x_{2,f}}{\alpha_2 - T} + \frac{\alpha_3 x_{3,f}}{\alpha_3 - T} + \dots + \frac{\alpha_k x_{k,f}}{\alpha_k - T} = 0 \quad (5.13)$$

Значения  $x_{1,D}$ ,  $x_{2,D}$ ,  $x_{3,D}$  находятся из уравнения (5.9).

Рабочее значение флегмового числа  $R = (1,1-1,5)R_{min}$ .

6. Расчет концентрации компонентов в смеси, стекающей с тарелки питания:

$$\begin{aligned} x_{1,f} &= \frac{W\beta_1 x_{1,W}}{(\beta_1 - 1)[D(R+1) + W] + \frac{Wx_{k,W}}{x_{k,f}}}; \\ x_{2,f} &= \frac{W\beta_2 x_{2,W}}{(\beta_2 - 1)[D(R+1) + W] + \frac{Wx_{k,W}}{x_{k,f}}}; \\ x_{(k-2),f} &= \frac{W\beta_{(k-2)} x_{(k-2),W}}{(\beta_{(k-2)} - 1)[D(R+1) + W] + \frac{Wx_{k,W}}{x_{k,f}}}; \\ x_{(k-1),f} &= 1 - (x_{1,f} + x_{2,f} + x_{3,f} + \dots + x_{(k-2),f} + x_{k,f}). \end{aligned} \quad (5.14)$$

Концентрация наиболее летучего компонента  $x_k$  принята равной его концентрации в исходной смеси.

7. Расчет числа теоретических тарелок в укрепляющей части колонны.

$$N_y = \frac{\lg \frac{x_{k,n} x_{(k-1),f}}{x_{(k-1),n} x_{k,f}}}{\lg(\alpha_{k-(k-1)})_y}, \quad (5.15)$$

где  $x_{k,f}$  и  $x_{(k-1),f}$  – концентрация компонентов  $k$  и  $k-1$  в жидкости, стекающей с тарелки питания;  $x_{(k-1),n}$  и  $x_{k,n}$  – концентрация тех же компонентов на  $n$ -й тарелке, считая снизу.



$$x_{(k-1),n} = \frac{\frac{x_{(k-1),D}}{\alpha_{(k-1)}}}{x_{1,D} + \frac{x_{2,D}}{\alpha_2} + \frac{x_{3,D}}{\alpha_3} + \dots + \frac{x_{k,D}}{\alpha_k}}; \quad (5.16)$$

$$x_{k,n} = \frac{\frac{x_{k,D}}{\alpha_k}}{x_{1,D} + \frac{x_{2,D}}{\alpha_2} + \frac{x_{3,D}}{\alpha_3} + \dots + \frac{x_{k,D}}{\alpha_k}}. \quad (5.17)$$

В знаменателе уравнения (5.15) стоит логарифм среднего значения (для укрепляющей части колонны) относительной эффективности разделения компонентов  $k$  и  $k-1$  на одной теоретической тарелке. Эта величина может быть найдена из уравнения:

$$[\alpha_{k-(k-1)}]_y = \frac{[\alpha_{k-(k-1)}]_{\theta,y} - [\alpha_{k-(k-1)}]_{n,y}}{2,31 \lg \frac{[\alpha_{k-(k-1)}]_{\theta,y}}{[\alpha_{k-(k-1)}]_{n,y}}}. \quad (5.18)$$

В этом уравнении выражение с индексом  $\theta,y$  относится к верхней части укрепляющей колонны, а  $n,y$  – к нижней части укрепляющей колонны.

$$[\alpha_{k-(k-1)}]_{\theta,y} = \frac{x_{k,D}}{x_{(k-1),D}} \left[ \frac{x_{(k-1),n} + \frac{x_{(k-1),D}}{R}}{x_{k,n} + \frac{x_{k,D}}{R}} \right]; \quad (5.19)$$

$$[\alpha_{k-(k-1)}]_{n,y} = \frac{x_{k,(f+1)} x_{(k-1),f}}{x_{(k-1),(f+1)} x_{k,f}}. \quad (5.20)$$

В этом уравнении величины с индексом  $f+1$  относятся к первой снизу тарелке укрепления, а с индексом  $f$  – к тарелке питания, при этом

$$x_{(k-1),(f+1)} = \frac{x_{(k-1),f} \alpha_{(k-1)}}{x_{1,f} + x_{2,f} \alpha_2 + x_{3,f} \alpha_3 + \dots + x_{k,f} \alpha_k} \left( \frac{R+1}{R} \right) - \frac{x_{(k-1),D}}{R}; \quad (5.21)$$

$$x_{k,(f+1)} = \frac{x_{k,f}\alpha_k}{x_{1,f} + x_{2,f}\alpha_2 + x_{3,f}\alpha_3 + \dots + x_{k,f}\alpha_k} \left( \frac{R+1}{R} \right) - \frac{x_{k,D}}{R}. \quad (5.22)$$

8. Расчет числа теоретических тарелок в колонне истощения.

$$N_u = \frac{\lg \frac{x_{k,f}x_{(k-1),W}}{x_{(k-1),f}x_{k,W}}}{\lg[\alpha_{k-(k-1)}]_u}. \quad (5.23)$$

Стоящее в квадратных скобках в знаменателе уравнения выражение является средним значением относительной эффективности разделения компонентов  $k$  и  $k-1$  на одной теоретической тарелке колонны истощения.

Это выражение может быть найдено как среднее логарифмическое для нижней части колонны истощения ( $н.у.$ ) и для верхней части колонны истощения ( $в.у.$ ):

$$[\alpha_{k-(k-1)}]_u = \frac{[\alpha_{k-(k-1)}]_{н.у.} - [\alpha_{k-(k-1)}]_{в.у.}}{2,3 \lg \frac{[\alpha_{k-(k-1)}]_{н.у.}}{[\alpha_{k-(k-1)}]_{в.у.}}}. \quad (5.24)$$

В уравнении (5.24)

$$[\alpha_{k-(k-1)}]_{в.у.} = \frac{x_{k,f}}{x_{(k-1),f}} \left[ \frac{x_{(k-1),f} - \frac{Wx_{(k-1),W}}{D(R+1)+W}}{x_{k,f} - \frac{Wx_{k,W}}{D(R+1)+W}} \right] \alpha_{k-(k-1)}, \quad (5.25)$$

$$[\alpha_{k-(k-1)}]_{н.у.} = \frac{x_{k,1}x_{(k-1),W}}{x_{(k-1),1}x_{k,W}}. \quad (5.26)$$

В этом уравнении  $x_{(k-1),1}$  — концентрация  $(k-1)$ -го компонента на первой тарелке находится по следующему уравнению:

$$x_{(k-1),1} = \frac{x_{(k-1),W} \alpha_{k-1}}{x_{1,W} + x_{2,W} \alpha_2 + x_{3,W} \alpha_3 + \dots x_{k,W} \alpha_k} \cdot \frac{D(R+1)}{D(R+1) + W} + \frac{W x_{(k-1),W}}{D(R+1) + W}; \quad (5.27)$$

Концентрация компонента  $k$  на первой тарелке  $x_{k,1}$  находится из уравнения:

$$x_{k,1} = \frac{x_{k,L} \alpha_k}{x_{1,L} + x_{2,L} \alpha_2 + x_{3,L} \alpha_3 + \dots x_{k,L} \alpha_k} \cdot \frac{D(R+1)}{D(R+1) + W} + \frac{W x_{k,L}}{D(R+1) + W}; \quad (5.28)$$

Общее число теоретических тарелок в колонне (без куба):

$$N = N_y + N_u$$

**Пример 4.** Определить состав дистиллята, кубового остатка, минимальное флегмовое число и число теоретических тарелок, необходимых для разгонки смеси фенола,  $o$  - крезоло,  $m$  - крезоло, ксилола, остатка.

Исходная смесь (мольн. доли) содержит: остатка  $x_{1,f} = 0,05$ ; ксилола  $x_{2,f} = 0,15$ ;  $m$  - крезоло  $x_{3,f} = 0,3$ ;  $o$  - крезоло  $x_{4,f} = 0,15$ ; фенола  $x_{5,f} = 0,35$ . Концентрация наиболее летучего компонента в дистилляте  $x_{5,D} = 0,953$ , в кубовом остатке  $x_{5,W} = 0,0524$ .

Коэффициенты относительной летучести по справочным данным:  $\alpha_5 = 14,4$ ;  $\alpha_4 = 11,5$ ;  $\alpha_3 = 8$ ;  $\alpha_2 = 5$ ;  $\alpha_1 = 1$ . И, соответственно,  $\beta_1 = 14,4$ ;  $\beta_2 = 2,88$ ;  $\beta_3 = 1,8$ ;  $\beta_4 = 1,25$ ;  $\beta_5 = 1$ .

*Решение.*

По уравнению

$$D = F \left( \frac{x_{k,f} - x_{k,W}}{x_{k,D} - x_{k,W}} \right)$$

находим количество дистиллята и кубового остатка на 100 молей питания:

$$D = 100 \left( \frac{0,35 - 0,0524}{0,953 - 0,0524} \right) = 33 \text{ моль}; \quad W = 100 - 33 = 67 \text{ моль}.$$

По уравнениям (5.9) и (5.10) определяем концентрацию компонентов в дистилляте:

$$x_{1,D} = \frac{0,953 \cdot 100 \cdot 0,05}{33 \cdot 0,953 + 67 \cdot 0,0524 \cdot 14,4^{N_0+1}} = \frac{4,765}{31,4 + 3,52 \cdot 14,4^{N_0+1}}.$$

Аналогично найдем:

$$x_{2,D} = \frac{14,3}{31,4 + 3,52 \cdot 2,88^{N_0+1}};$$

$$x_{3,D} = \frac{28,6}{31,4 + 3,52 \cdot 1,8^{N_0+1}};$$

$$x_{4,D} = \frac{14,3}{31,4 + 3,52 \cdot 1,25^{N_0+1}}.$$

Подставим полученные концентрации в уравнение (5.8):

$$\frac{4,765}{31,4 + 3,52 \cdot 14,4^{N_0+1}} + \frac{14,3}{31,4 + 3,52 \cdot 2,88^{N_0+1}} + \frac{28,6}{31,4 + 3,52 \cdot 1,8^{N_0+1}} + \frac{14,3}{31,4 + 3,52 \cdot 1,25^{N_0+1}} = 1 - 0,953 = 0,047$$

Решая эту систему уравнений, найдем:

$$N_0 = 18; x_{1,D} \cong 0; x_{2,D} \cong 0; x_{3,D} = 0,0015; x_{4,D} = 0,0455; x_{5,D} = 0,953.$$

Для определения концентрации компонентов в кубовом остатке воспользуемся уравнением (5.11)

$$x_{1,W} = \frac{100 \cdot 0,05 - 33,0}{67} = 0,075.$$

Аналогично найдем  $x_{2,W} = 0,224$ ,  $x_{3,W} = 0,447$ ,  $x_{4,W} = 0,202$ ,  $x_{5,W} = 0,0524$ .

Определяем по уравнению (5.12) минимальное флегмовое число  $R_{min}$ ; для этого сначала по уравнению (5.13) находим функцию  $T$ :

$$\frac{0,05}{1-T} + \frac{5 \cdot 0,15}{5-T} + \frac{8 \cdot 0,3}{8-T} + \frac{11,5 \cdot 0,15}{11,5-T} + \frac{14,4 \cdot 0,35}{14,4-T} = 0,$$

откуда  $T \cong 12,5$

По уравнению (5.12)

$$R_{\min} = \frac{0}{1-12,5} + \frac{5 \cdot 0}{5-12,5} + \frac{8 \cdot 0,0015}{8-12,5} + \frac{11,5 \cdot 0,0455}{11,5-12,5} + \frac{14,4 \cdot 0,35}{14,4-12,5} - 1 = 5,62;$$

примем  $R = 1,25 \cdot R_{\min} = 1,25 \cdot 5,62 = 7$ .

Прежде чем определить  $N = N_y + N_u$ , найдем концентрацию компонентов смеси, стекающей с тарелки питания. Для этого воспользуемся уравнением (5.14), приняв  $x_{k,f} = x_{5,f}$

$$x_{1,f} = \frac{67 \cdot 14,4 \cdot 0,075}{(14,4 - 1)[33(7 + 1) + 67] + \frac{67 \cdot 0,0524}{0,35}} = 0,017;$$

$$x_{2,f} = \frac{67 \cdot 2,88 \cdot 0,224}{(2,88 - 1)[33(7 + 1) + 67] + \frac{67 \cdot 0,0524}{0,35}} = 0,067;$$

$$x_{3,f} = \frac{67 \cdot 1,8 \cdot 0,447}{(1,8 - 1)[33(7 + 1) + 67] + \frac{67 \cdot 0,0524}{0,35}} = 0,2.$$

Аналогично найдем  $x_{4,f} = 0,24$ ;

$$x_{k,f} = 1 - (0,017 + 0,068 + 0,2 + 0,24) = 0,475.$$

Как видно,  $x_{k,f} > x_{5,f}$ , однако величина  $x_{k,f}$  мало влияет на значения  $x_{1,f}$ ,  $x_{2,f}$ ,  $x_{3,f}$  и  $x_{4,f}$ , поэтому пересчет можно не производить.

Имея концентрацию компонентов в смеси, стекающей с тарелки питания, определим по уравнениям (5.15 – 5.22) число тарелок в колонне укрепления. Расчет ведется для 4 и 5-го компонентов.

Найдем сначала по уравнению (5.16) значение концентрации  $(k-1)$  компонента на  $n$ -й тарелке:

$$x_{(k-1),n} = x_{4,n} = \frac{\frac{0,0455}{11,5}}{0 + 0 + \frac{0,0015}{8} + \frac{0,0455}{11,5} + \frac{0,953}{14,4}} = 0,056.$$

По уравнению (5.17) найдем  $x_{k,n}$ :

$$x_{k,n} = \frac{\frac{0,953}{14,4}}{0 + 0 + \frac{0,0015}{8} + \frac{0,0455}{11,5} + \frac{0,953}{14,4}} = 0,935.$$

Далее вычислим величину  $[\alpha_{k-(k-1)}]_y$  по уравнению (5.19):

$$[\alpha_{k-(k-1)}]_{\theta y} = [\alpha_{5-4}]_{\theta y} = \frac{0,953}{0,0455} \cdot \frac{0,056 + \frac{0,0455}{7}}{0,935 + \frac{0,953}{7}} = 1,16.$$

Из уравнения (5.22) определим

$$x_{k,(f+1)} = x_{5,(f+1)} = \frac{0,475 \cdot 14,4 \cdot \left(\frac{7+1}{7}\right)}{0,017 + 0,067 \cdot 5 + 0,2 \cdot 8 + 0,24 \cdot 11,5 + 0,475 \cdot 14,4 - \frac{0,953}{7}} = 0,54.$$

Из уравнения (5.20) определим:

$$x_{(k-1),(f+1)} = x_{4,(f+1)} = \frac{0,24 \cdot 11,5 \cdot \left(\frac{7+1}{7}\right)}{0,017 + 0,067 \cdot 5 + 0,2 \cdot 8 + 0,24 \cdot 11,5 + 0,475 \cdot 14,4 - \frac{0,0455}{7}} = 0,3.$$

Из уравнения (5.20) определяем величину

$$[\alpha_{k-(k-1)}]_{ny} = [\alpha_{5-4}]_{ny} = \frac{0,54 \cdot 0,24}{0,3 \cdot 0,475} = 0,91.$$

Далее по уравнению (5.18) находим значение  $(\alpha_{5-4})_y$ .

$$(\alpha_{5-4})_y = \frac{1,16 - 0,91}{2,3 \lg \frac{1,16}{0,91}} = 1,13.$$

Затем по уравнению (5.15) находим число теоретических тарелок в укрепляющей части колонны:

$$N_y = \frac{\lg \frac{0,935 \cdot 0,24}{0,056 \cdot 0,475}}{\lg 1,13} = 17.$$

Продолжая расчет по формулам (5.23) – (5.28), получим для колонны истощения 18,6 тарелок.

Метод расчета от тарелки к тарелке дает соответственно 17 тарелок для колонны укрепления и 18 тарелок для колонны истощения.

Таким образом, полученные по приближенному методу результаты вполне удовлетворительны.

Б. Берго и В. Платонов, используя ряд приближенных методов расчета процесса ректификации многокомпонентных систем, сделали заключение о пределах их применения. Они отмечают, что метод Михайловского не применим при расчете процесса с отбором в виде дистиллята более одного компонента и дает неудовлетворительные результаты при расчете ректификации смесей близкокипящих компонентов.

## 5.5. Расчет ректификации многокомпонентных смесей на ЭВМ

Как известно, математическая модель ректификации должна учитывать балансовые соотношения, парожидкостное равновесие, кинетику массопередачи и гидродинамику потоков.

Основу модели составляют материальный и тепловой балансы колонны. Парожидкостное равновесие, кинетика массопередачи и гидродинамика потоков представляют собой самостоятельные сложные задачи. Использование различных методов учета фазового равновесия, кинетики и гидродинамики приводит к изменению отдельных коэффициентов или зависимостей в балансовых соотношениях, однако не изменяет общего алгоритма решения.

В связи с большой размерностью задачи и ее нелинейностью разработка универсальных алгоритмов, которые гаран-

тировали бы сходимость при различных способах описания отдельных явлений, представляет значительные трудности.

Основная трудность расчета массообменных аппаратов заключается в обеспечении сходимости решения систем уравнений материального и теплового балансов. Причем эти сложности возрастают для смесей с сильно неидеальными свойствами.

Решение систем уравнений производится итерационно, исходя из некоторого начального приближения для зависимых переменных. Такой подход свойственен всем методам решения систем нелинейных уравнений.

Все методы расчета процесса ректификации можно разделить на две группы: потарелочные и матричные.

В потарелочных методах расчет выполняется последовательно, начиная с куба или дефлегматора от тарелки к тарелке с последующей проверкой выполнения уравнений материального баланса, либо с обоих концов колонны до тарелки питания с проверкой условий сопряжения в месте ввода питания; после очередного расчета уточняется начальное приближение, и вычисление повторяется до выполнения критерия окончания расчетов.

В матричных методах по каждому из компонентов исходной смеси записывается система уравнений, и решение осуществляется матричными методами. Поскольку начальное приближение выбирается произвольно, то после выполнения очередной операции производится коррекция искомых переменных.

Матричные методы находят все более широкое применение, т.к. проявляется меньшая склонность к накоплению ошибок округления и соответственно большая устойчивость вычислительных схем при расчете колонн с несколькими питаниями и боковыми отборами. К тому же при расчете комплекса колонн снимается проблема задания топологии системы, т.к. все связи между колоннами отражены соответствующими коэффициентами в матрице системы уравнений баланса.

В качестве независимых переменных Льюис и Матисон предложили принимать количественный состав продуктов разделения (потарелочный расчет), а Тиле и Геддес – темпе-



ратуру на каждой тарелке. Наибольшее распространение получили методы, основанные на задании температуры кипения по высоте колонны, известные под названием «независимого определения концентраций». Считается, что примерно 80% задач по расчету ректификационных колонн обеспечивают методы Тиле и Геддеса. Поэтому при разработке алгоритмов расчетов важное внимание уделяется и разработке процедур, ускоряющих время решения и его сходимость. Одним из таких способов, широко применяемых в практике расчетов, является  $\theta$ -метод коррекции, основанный на коррекции составов, исходя из решения уравнений общего материального баланса колонны.

*Матричные методы*, составляющие большинство известных методов расчета массообменных аппаратов и их комплексов, можно разделить на две группы по способу линеаризации балансовых соотношений. К первой группе относятся методы, в которых линейность достигается за счет использования численных значений параметров, определяющих нелинейность с предыдущих итераций. Типичным примером является метод Тиле и Геддеса, реализованный в матричной форме. Для него характерна трехдиагональная структура матрицы системы уравнений баланса (уравнение 5.34), простота хранения коэффициентов системы уравнений. Однако, являясь по скорости сходимости методом первого порядка, он в ряде случаев обладает слишком медленной скоростью сходимости или вообще не обеспечивает решения. Другим способом линеаризации является разложение функции (уравнения баланса) в ряд Тейлора до членов первого порядка. Полученная система уравнений решается методом Ньютона-Рафсона (см. раздел 5.5.2). Этот способ обладает квадратичной сходимостью, однако весьма чувствителен к начальному приближению (Приложение 1).

Особое место занимает *метод релаксации* (см. раздел 5.5.4), заключающийся в том, что расчет нестационарного процесса осуществляется в результате решения системы обыкновенных дифференциальных уравнений материального баланса для установившегося состояния. Метод релаксации обладает устойчивой сходимостью независимо от сложности задачи, однако по мере приближения к решению задачи ско-