**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТАДИИ МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ РЕКТИФИКАЦИИ**

Применение метода математического моделирования при разработке новых процессов часто помогает заранее показать, насколько они технически и экономически целесообразны. Моделирования действующих установкой позволяет оптимизировать условия их эксплуатации для повышения качества продуктов, снижения энергопотребления и прочих потерь в рамках технологического процесса.

Математическое моделирование многокомпонентной ректификации является довольно сложной задачей ввиду большого количества параметров и переменных, а также необходимости решать большое количество нелинейных и дифференциальных уравнений.

Уравнения представленной модели ректификационной колонны выведены из баланса массы и энергии, баланса массы по компонентам и уравнений фазового равновесия. Данные уравнения сильно отклоняются от линейных, в особенности те, которые описывают фазовые равновесия и энергетические балансы.

Решение системы нелинейных уравнений является сложной задачей и требует предварительного выбора метода, имеющего надежную сходимость.

Полученная модель разбита на несколько этапов, на каждом из которых рассчитывается набор неизвестных параметров модели (мольная доля компонентов, температурный профиль, профиль по пару и жидкости и т. д.). При составлении данной модели были сделаны следующие допущения:

1. рассматривается стационарный режим;
2. в процессе ректификации химические превращения компонентов не протекают;
3. паровая и жидкая фазы однородны на всех ступенях разделения;
4. пар и жидкость, покидающие любую ступень разделения, находятся в фазовом равновесии.

Для того, чтобы сделать модель как можно более общей, предполагается, что на любой ступени может существовать поток питания, а выходные потоки (кубовый остаток и дистиллят) могут находиться в жидкой фазе, паровой фазе или в обеих фазах.

Схематическое представление ректификационной колонны представлено на рисунке 1. Схема входных и выходных потоков для отдельной ступени разделения представлена на рисунке 2.



Рисунок 1 – Схематическое представление ректификационной колонны



Рисунок 2 – Схема входных и выходных потоков для отдельной ступени разделения

Где *Fj* – расход потока питания *j*-ой ступени; *Qj* – тепловая нагрузка *j*-ой ступени (тепло, покидающее ступень *j*); *Lj* – расход жидкости, покидающей *j*-ую ступень и поступающей на ступень *j+1*; *Vj* – расход пара, покидающего *j*-ую ступень; *Wj* – паровой боковой отбор *j*-ой ступени. Потоки *U* и *W* используются для обозначения боковых отборов. Потоки дистиллята (*D*) и кубового остатка (*W*) могут отбираться как в виде жидкости (*LD*, *LB*), так и в виде пара (*VB*, *VD*), при этом *D = LD + VD* и *B = VB + VD*. Рассматривается *n* ступеней разделения, начиная с конденсатора (*j = 1*) и продолжая до ребойлера (*j = n*).

Материальный баланс *j*-ой ступени записывается в следующем виде:



Суммируя материальные балансы всех ступеней, получим общий материальный баланс:



Материальный баланс по *i*-му компоненту для *j*-ой ступени записывается в следующем виде:



Общий материальный баланс по *i*-му компоненту:



где *xij* – доля *i*-го компонента в жидкой фазе *j*-ой ступени; *yij* - доля *i*-го компонента в паровой фазе *j*-ой ступени; *zij* - доля *i*-го компонента в потоке питания *j*-ой ступени.

Тепловой баланс j-ой ступени можно записать в следующем виде:



где *HFj* – энтальпия потока сырья *j*-ой ступени; *HVj* - энтальпия потока пара *j*-ой ступени; *HLj* - энтальпия потока жидкости *j*-ой ступени.

Общий тепловой баланс может быть получен путем сложения тепловых балансов каждой ступени:



или в эквивалентной форме:



Рассматриваемый алгоритм требует начальных оценок температуры, потоков жидкости и пара, а также расходы боковых отборов. Для первоначальных оценок температуры использована модель, основанная значениях температур кипения (*TSAT*) чистых компонентов при рабочем давлении колонны (*Pco*l).

В качестве начального приближения для профиля температур (T(0)) по колонне рассматривается линейное распределение, при котором в середине колонны имеем среднюю температуру (*Tave*), рассчитанную на основе компонентного состава потоков сырья:



Минимальная температура равна разности *Tave* и среднего абсолютного отклонения (*AAD*):



Таким образом,



Начальным этапом расчета является ввод данных. Данные, необходимые для математической модели процесса многокомпонентной ректификации представлены ниже:

1. число компонентов, *m*;
2. число ступеней разделения, *n*;
3. профиль давления в колонне, *Pcol*;
4. расходы потоков питания *Fj* для *j* *= 1*, …, *n*;
5. температуры потоков питания *TFeedj* для *j* = 1, …, *n*;
6. составы потоков питания *zij* для *j = 1, …, n* и для *i = 1, …, m*;
7. физико-химические и критические свойства компонентов для расчета фазового равновесия.

Блок-схема алгоритма расчета процесса многокомпонентной ректификации представлена на рисунке 3.



Рисунок 3 – Блок-схема алгоритма расчета многокомпонентной ректификации

Используя материальный баланс для ступени и уравнение фазового равновесия получим:











Таким образом, получим трех-диагональную систему линейных уравнений для каждого компонента:



Температуры на каждой ступени являются единственным набором неизвестных, которые нельзя рассчитать линейным методом. Температурный профиль рассчитывается поэтапно при условии, что сумма мольных долей в паровой фазе должна быть равна единице с помощью соотношения фазового равновесия:



Решение на данном этапе можно получить с использованием итерационных методов определения корней нелинейных уравнений, например, методом секущих:



Имея значения температур, а также составы потоков жидкости для каждой ступени, можно определить составы потоков пара, используя уравнение фазового равновесия.

Значения потоков пара по колонне можно определить следующим образом:











Расходы боковых отборов рассчитываются путем подстановки соотношения между боковым отбором и потоком, покидающим ступень в соответствии с материальным балансом:





Профиль колонны по жидкости рассчитывается последовательно, от ступени *1* к ступени *n-1*, в соответствии с материальным балансом:



Итерационный процесс завершается, когда изменения выбранных неизвестных становятся малыми величинами, что также зависит от заранее выбранной степени точности расчетов (*eps*):









