**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ 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*):



**Моделирование колонны-деизобутанизатора на установке сернокислотного алкилирования изобутана олефинами**

Колонна-деизобутанизатор предназначена для получения изобутановой фракции с содержанием изобутана не менее 85 % объемных. Колонна имеет 60 клапанных тарелок. Подвод тепла, необходимого для процесса ректификации осуществляется за счет подогрева продукта куба колонны водяным паром. Сырьем колонны является сырой алкилат, поступающий на 10 тарелку (счет сверху), также в колонну на 22 тарелку дополнительно поступает поток подпиточного изобутана. Составы потоков представлены в таблице 1.

Таблица 1. Состав потоков питания колонны-деизобутанизатора

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Компонент | Сырой алкилат | Подпиточный изобутан |
| мольные доли | |
| Пропан | 0,0302 | 0,0058 |
| Бутен-1 | 0,0000 | 0,0000 |
| Бутен-2 | 0,0000 | 0,0008 |
| Изобутен | 0,0000 | 0,0024 |
| Изобутан | 0,6219 | 0,9535 |
| н-Бутан | 0,1657 | 0,0375 |
| Изопентан | 0,0246 | 0,0000 |
| Диметилбутаны | 0,0106 | 0,0000 |
| Триметилпентаны | 0,1195 | 0,0000 |
| Диметилгексаны | 0,0180 | 0,0000 |
| Диметилпентаны | 0,0096 | 0,0000 |

Моделирование колонны-деизобутанизатора выполнено при следующих спецификациях:

1. расход сырого алкилата: 1618 кмоль / ч;
2. расход подпиточного изобутана: 103,1 кмоль / ч;
3. расход острого орошения: 1313 кмоль / ч;
4. расход продуктового изобутана (поток дистиллята): 376,2 кмоль / ч;
5. давление в верху колонны: 0,626 МПа;
6. давление в низу колонны: 0,655 МПа;
7. полный конденсатор.

Применяя описанный выше алгоритм, для заданных параметров процесса многокомпонентной ректификации решение было получено за 10 итераций. График ошибки вычислений представлен на рисунке 4.

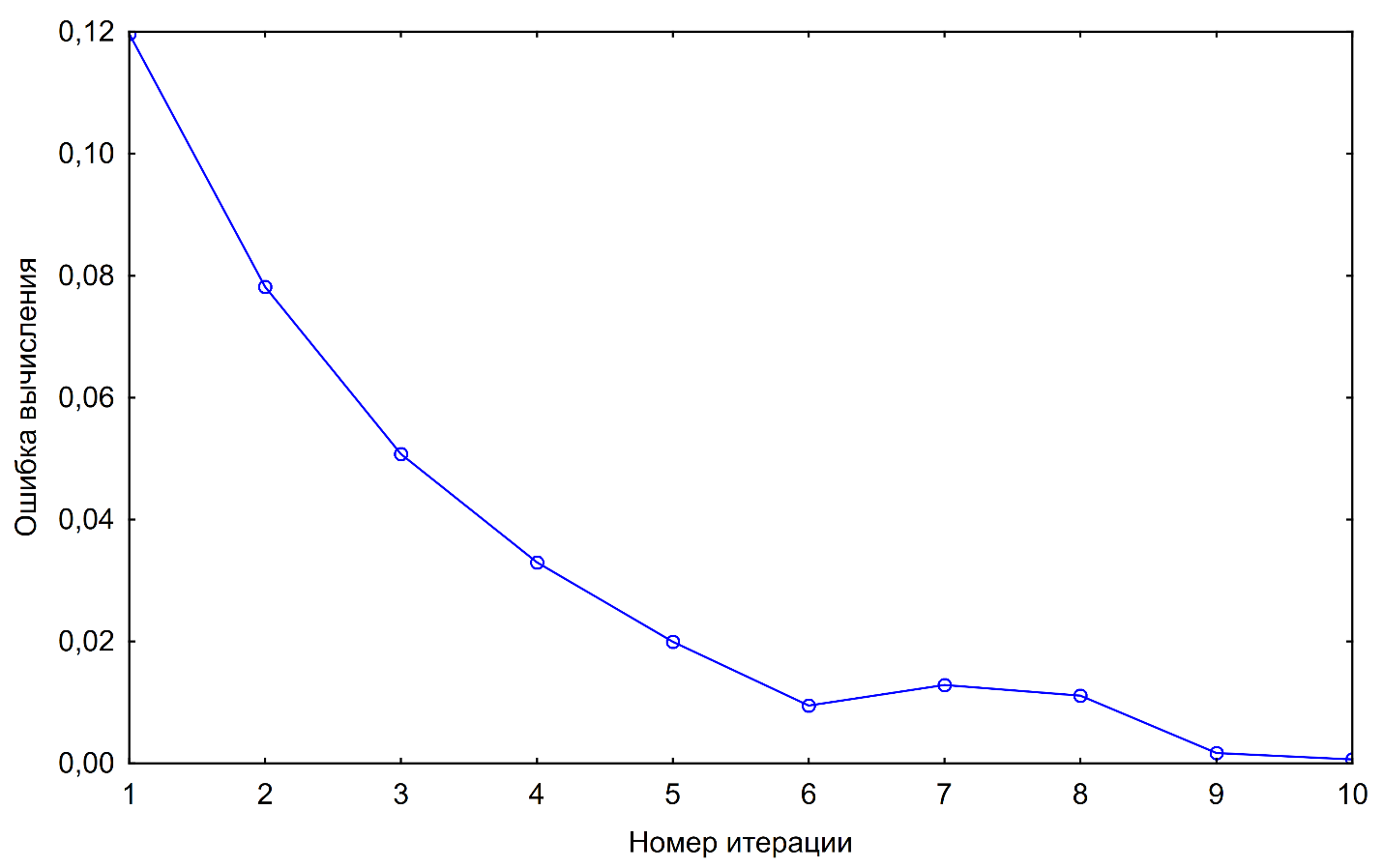


Рисунок 4 – Скорость сходимости расчета колонны-деизобутанизатора

На рисунке 5 показано сравнение начального приближения профиля температур по колонне с расчетными значениями.

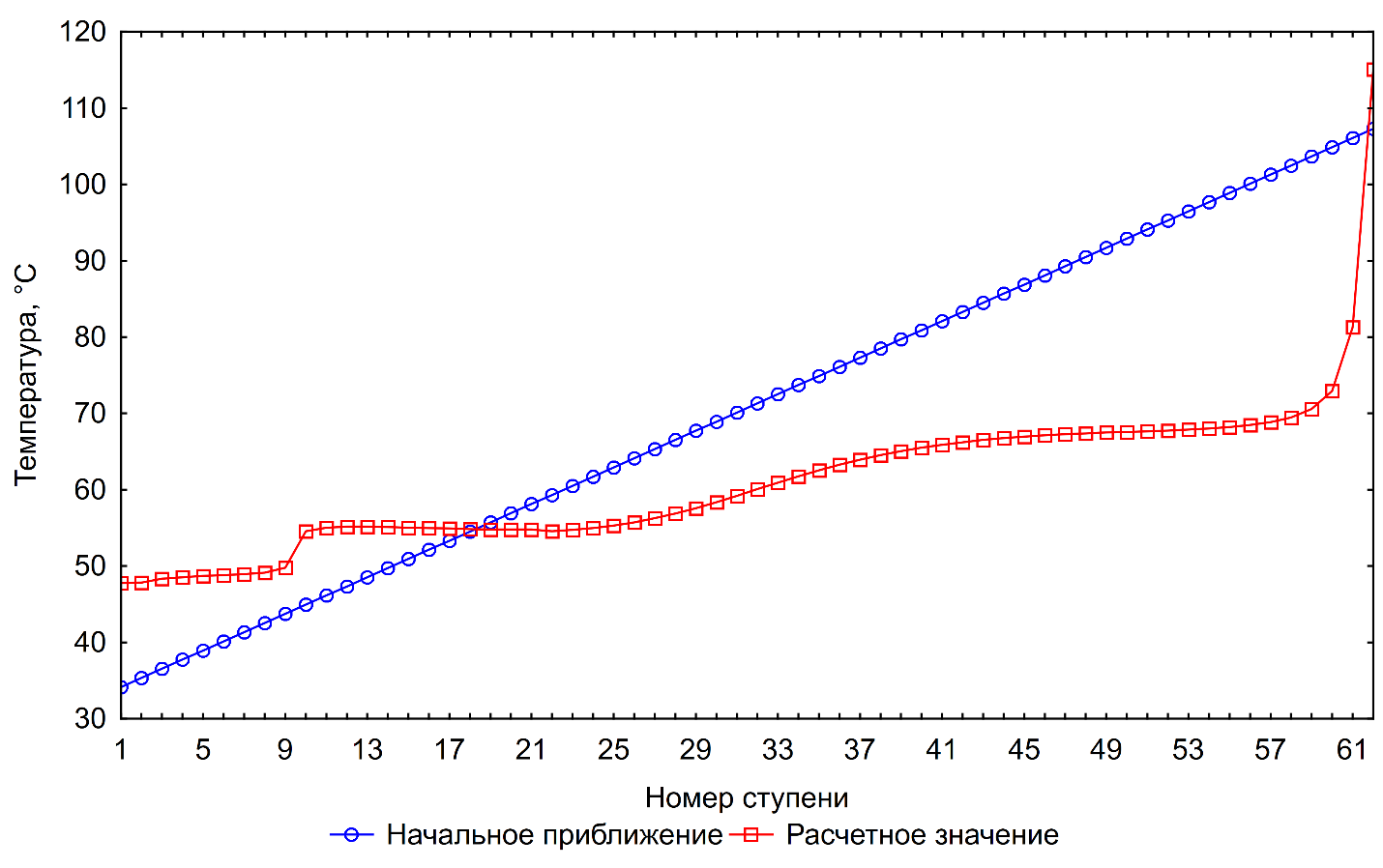


Рисунок 5 – Начальное приближение и результат расчета профиля температуры

На рисунках 6, 7 показано сравнение начальных приближений и расчетных значений профилей колонны по жидкости и пару. Начальные приближения очень близки к расчетным значениям.

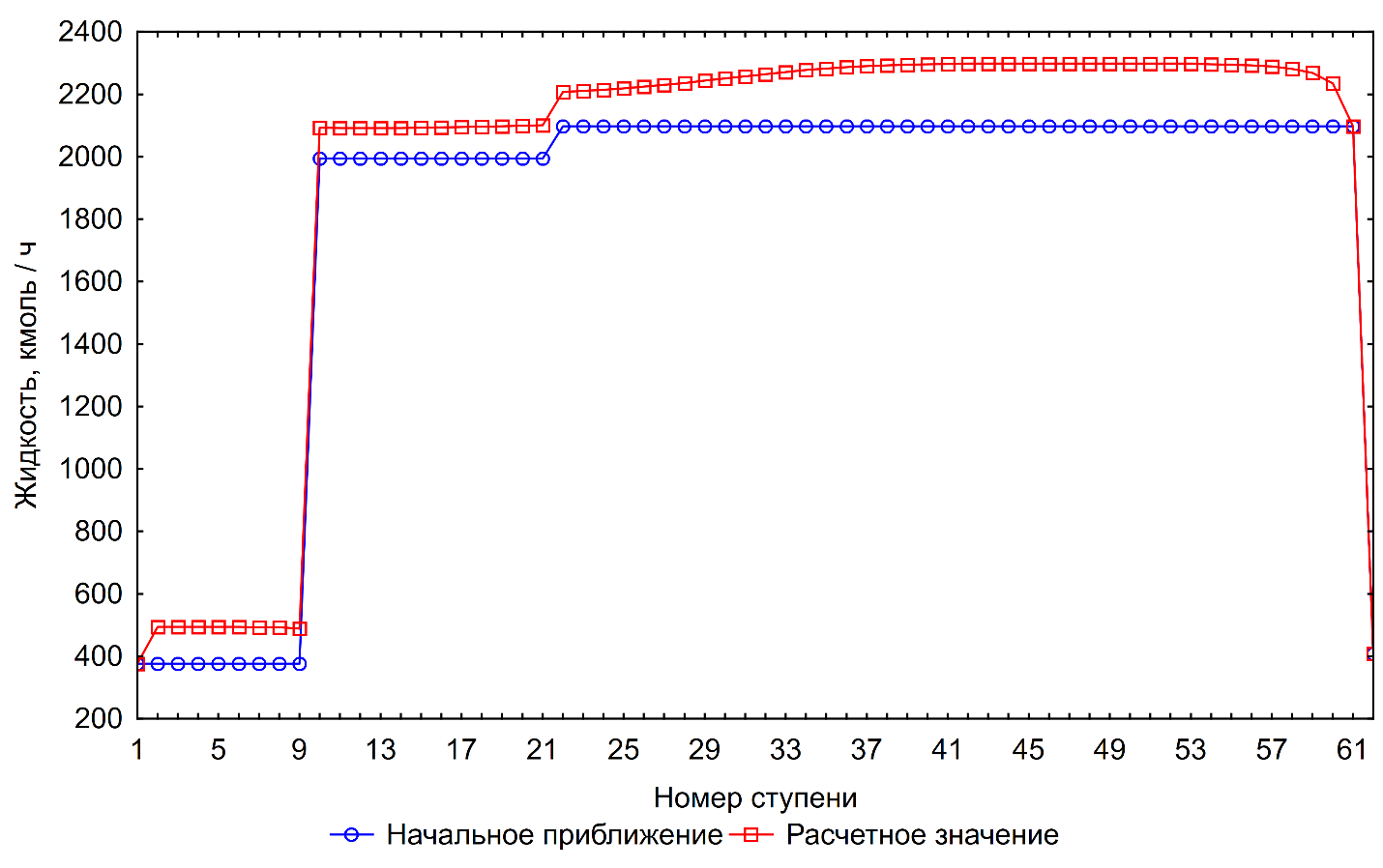


Рисунок 6 – Начальное приближение и расчетное значение профиля по жидкости

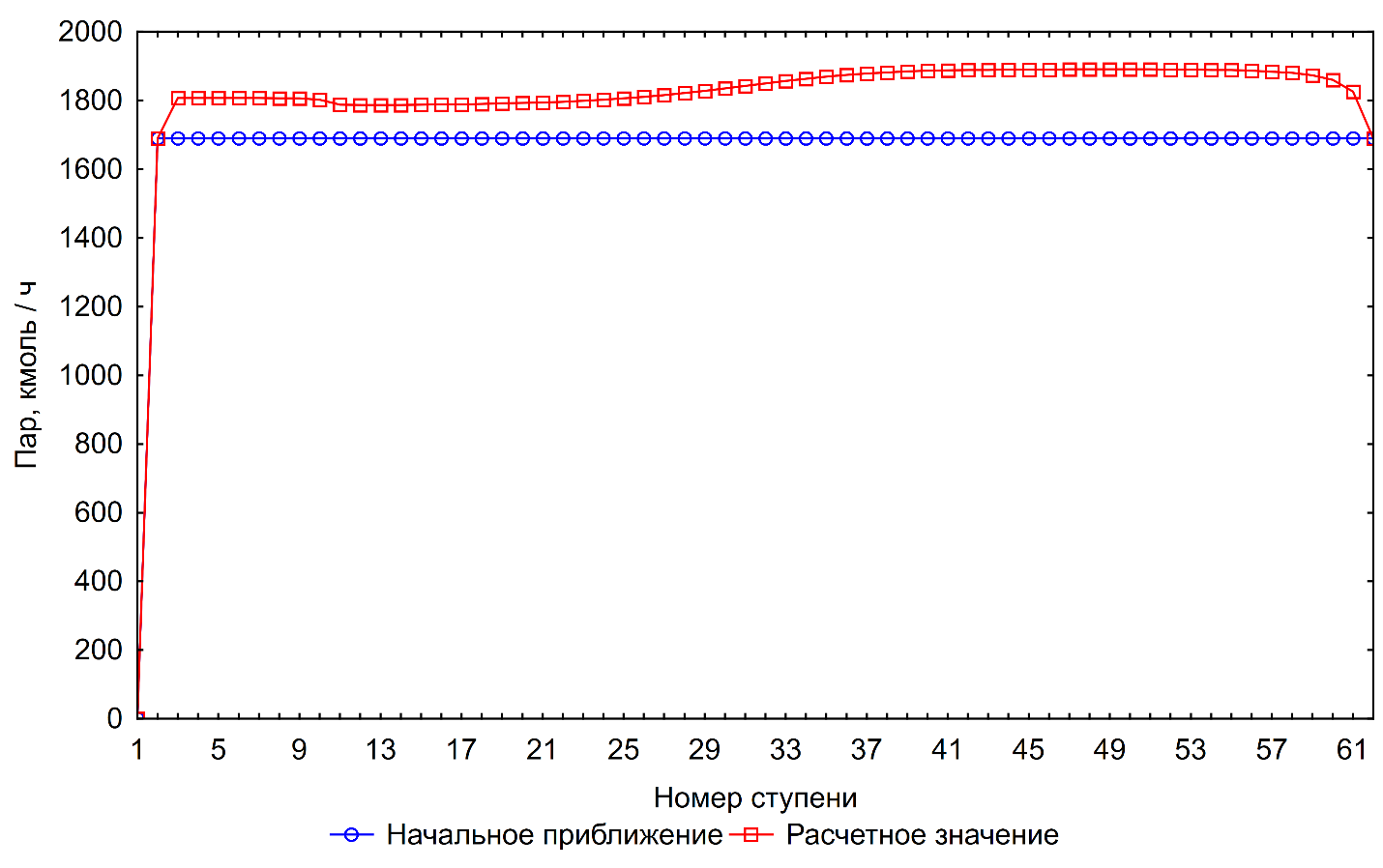


Рисунок 7 – Начальное приближение и расчетное значение профиля по пару

На рисунках 8, 9 представлены профили компонентов для жидкой и паровой фаз. Так как назначение данной колонны заключается в максимальном отделении изобутана, то, фактически, задача сводится к четкому разделению изобутана и нормального бутана (плюс все более высококипящие компоненты). Представленные профили закономерно описывают этот процесс, так как наблюдается постепенное увеличение доли изобутана и снижение доли н-бутана при движении от низа колонны к ее верху и наоборот как для паровой, так и для жидкой фазы.

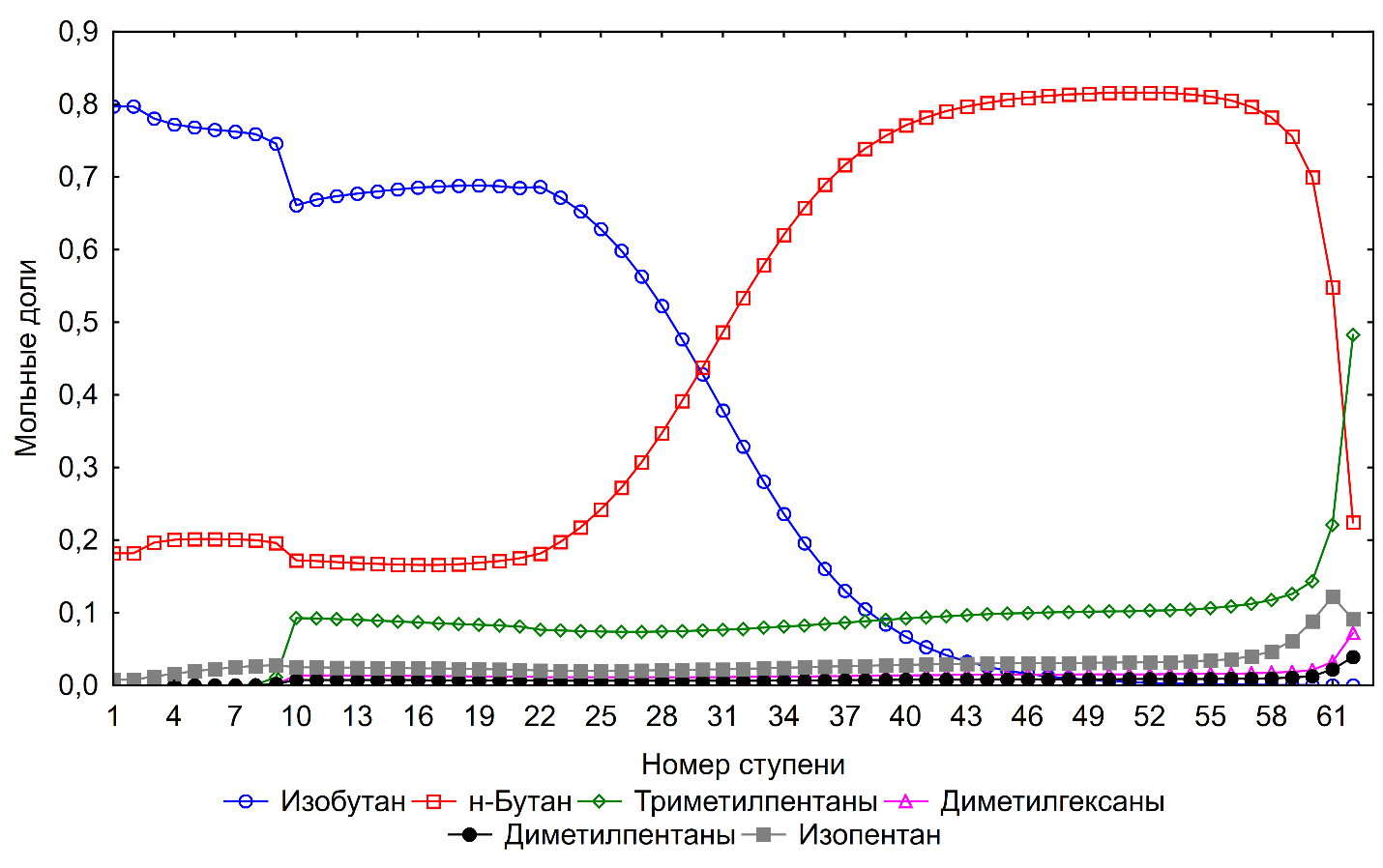


Рисунок 8 – Профиль концентраций компонентов (жидкость)

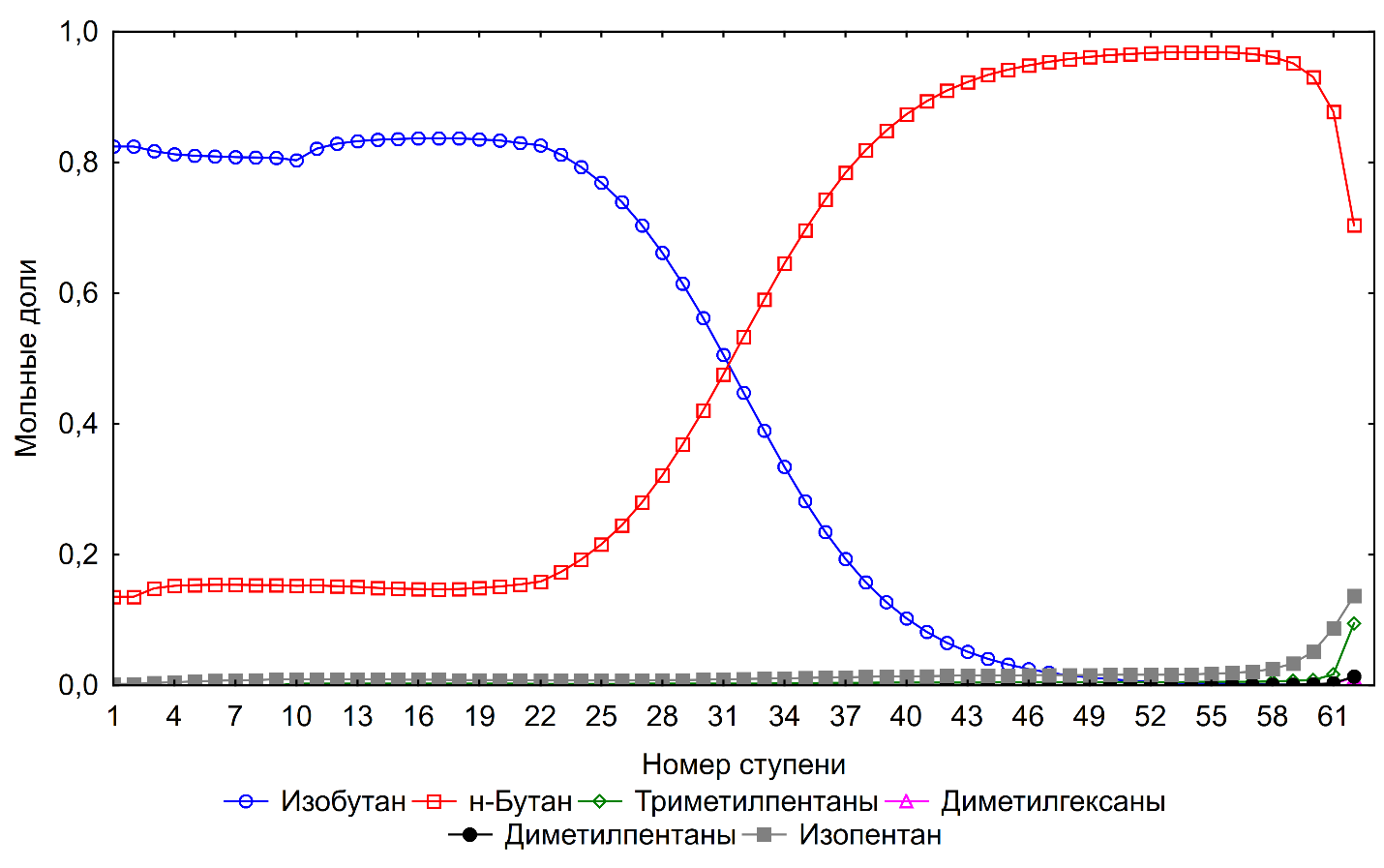


Рисунок 9 – Профиль концентраций компонентов (пар)

На рисунках 10, 11 приведена оценка сходимости расчетных составов дистиллята и кубового продукта с фактическими значениями. По результатам данной оценки можно заключить, что предложенная модель дает удовлетворительные результаты и может быть использована при расчете и проектировании технологических процессов разделения многокомпонентных смесей, а также для совершенствования действующих установок многокомпонентной ректификации.

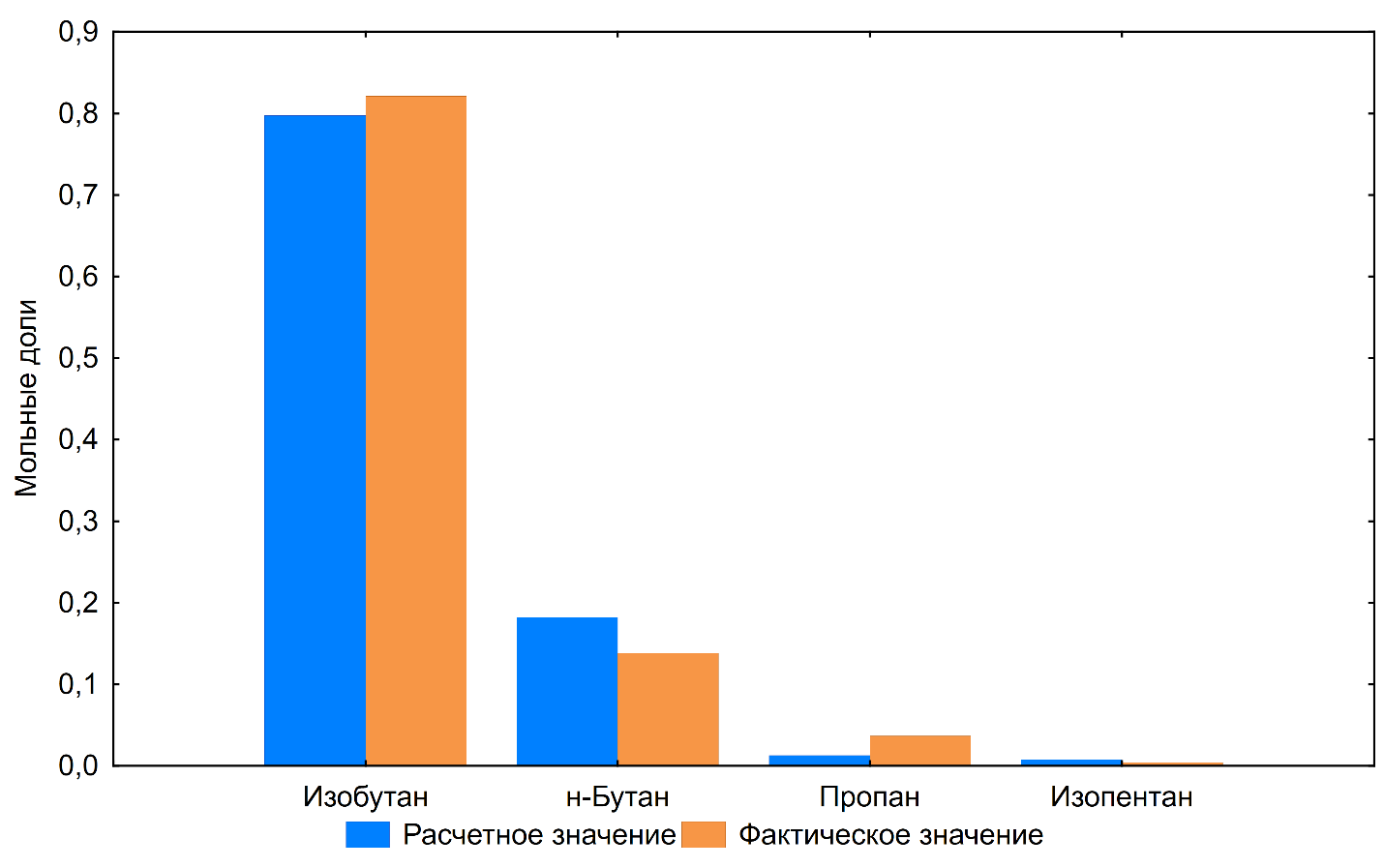


Рисунок 10 – Расчетный и фактический составы дистиллята

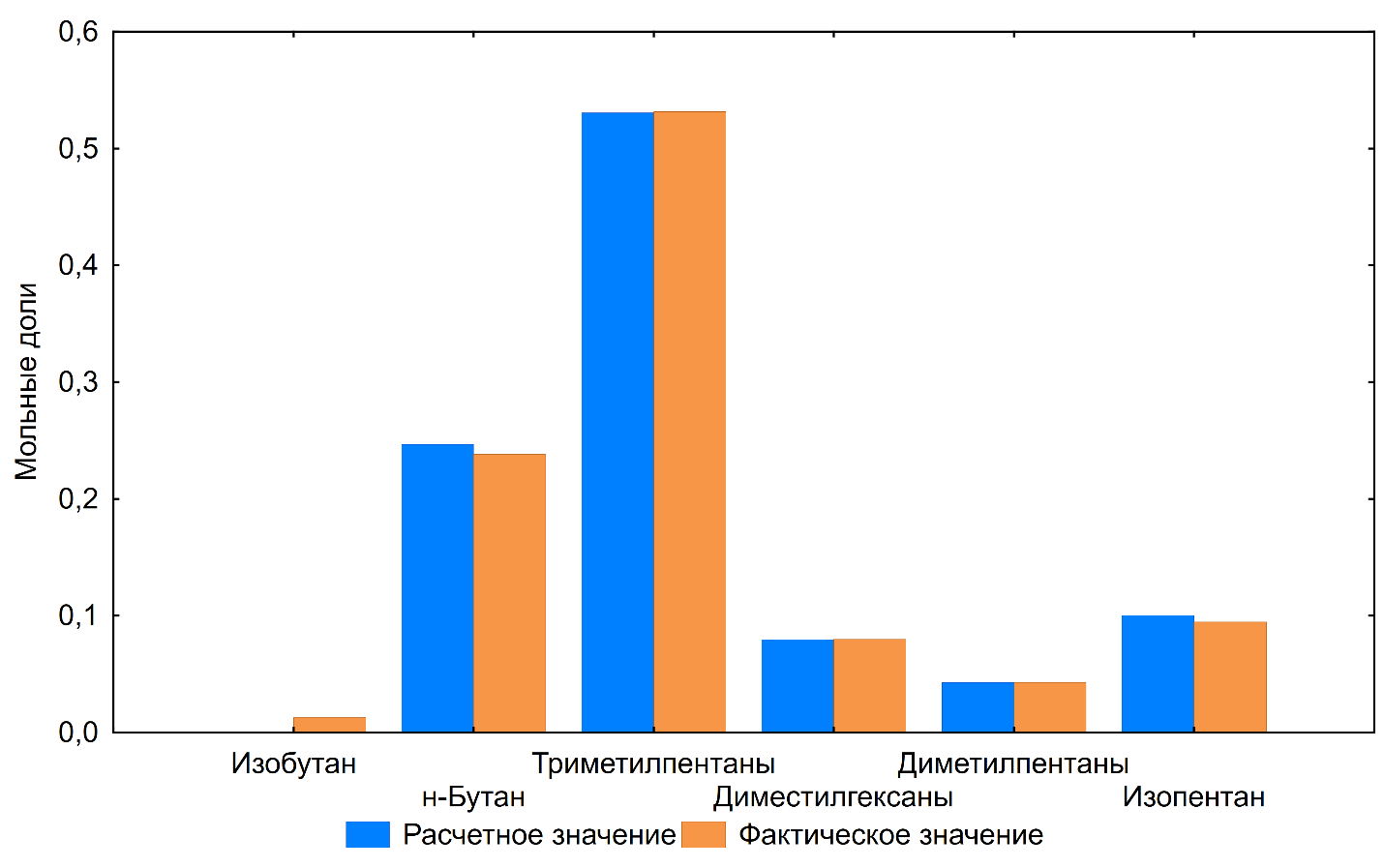


Рисунок 11 – Расчетный и фактический составы кубового продукта

Таким образом, предложенный алгоритм расчета процесса многокомпонентной ректификации позволяет получить приемлемую степень точности результатов, при довольно высокой скорости сходимости. Метод оценки температурного профиля дает надежные значения начальных приближений, что обеспечивает высокую точность и скорость сходимости расчетов.