

# Область реализуемых нагрузок бинарной ректификации и последовательность разделения трехкомпонентной смеси

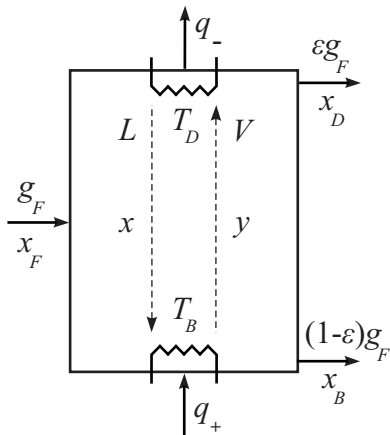
И.А. Сукин

1 декабря 2013 г.

# Введение и постановка задачи

- Задачам оптимальной организации процессов разделения смесей посвящено множество работ
- Существующие решения игнорируют кинетику процесса ректификации и гидродинамическую обстановку в аппаратах
- Используются эмпирические коэффициенты или эвристические правила
- Для выбора оптимальной последовательности разделения многокомпонентных смесей обратимые оценки неприменимы
- В данной работе произведен учет необратимости через кинетику процессов тепло- и массопереноса

# Модель колонны бинарной ректификации



- $q$  - потоки тепла
- $g$  - потоки массы
- $x, y$  - концентрации веществ
- $V$  - поток пара
- $L$  - поток флегмы
- $\varepsilon$  - доля отбора

# Основные допущения

- Массообмен между паром и флегмой эквимольярный
- В каждом сечении по высоте колонны давления и температуры потоков пара и жидкости близки друг к другу (от сечения к сечению они изменяются)
- Эффекты диффузии между соседними сечениями пренебрежимо малы
- Теплота выходящих потоков передается потокам, поступающим в колонну, причем необратимостью этого теплообмена можно пренебречь
- Поток разделяемой смеси в форме жидкости подается при температуре кипения в то сечение колонны, состав флегмы в котором совпадает с составом этого потока

# Термодинамические балансы для колонны бинарной ректификации

## ■ Энергетический баланс

$$q_+ - q_- + g_F h_F - g_F \varepsilon h_D - g_F (1 - \varepsilon) h_B = 0$$

## ■ Энтропийный баланс

$$g_F s_F - g_F \varepsilon s_D - g_F (1 - \varepsilon) s_B + \frac{q_+}{T_B} - \frac{q_-}{T_D} + \sigma = 0$$

## ■ $\sigma > 0$ - производство энтропии в колонне

# Связь производительности и теплового потока

- Химические потенциалы:

$$\mu_i(T, P, x_i) = \mu_{i0}(P, T) + RT \ln x_i, \quad i = D, B, F$$

- Обратимая работа разделения:

$$A_i = -RT_D \left[ x_i \ln x_i + (1 - x_i) \ln(1 - x_i) \right], \quad i = D, B, F$$

- Работа разделения Гиббса:  $A_G = A_F - \varepsilon A_D - (1 - \varepsilon) A_B$

- КПД Карно:  $\eta_K = (1 - T_D/T_B)$

- Итоговая зависимость:

$$g_F = q \frac{\eta_K}{A_G} - \sigma(q, g_F) \frac{T_D}{A_G}$$

# Вклад теплообмена в необратимость

- Потоки теплоты в кубе и дефлегматоре пропорциональны разности температур

$$q = rV = \beta_B(T_+ - T_B) = \beta_D(T_D - T_-)$$

- Производство энтропии за счет тепловых процессов в кубе и дефлегматоре равно

$$\sigma_q = q \left[ \frac{1}{T_B} - \frac{1}{T_+} + \frac{1}{T_-} - \frac{1}{T_D} \right] = q^2 \left[ \frac{1}{\beta_B T_B T_+} + \frac{1}{\beta_D T_D T_-} \right]$$

- Здесь  $r$  - мольная теплота парообразования,  $\beta_i$  - коэффициенты теплопереноса

# Вклад массообмена в необратимость

- Закон массопереноса пропорционален движущей силе

$$g(y, y^0) = k \frac{[\mu_1(T, y^0) - \mu_1(T, y)]}{T}$$

- Оценка снизу производства энтропии за счет процессов массопереноса в колонне

$$\sigma_g \geq \frac{2(x_D - x_B)q^2}{kr^2}$$

- Коэффициент массопереноса  $k$  зависит от условий внутри колонны и коэффициентов относительной летучести ( $\alpha$ ) компонентов смеси



# Параметризация зависимости производительности колонны от затрат теплоты с учетом необратимости

- Обратимый КПД

$$b = \frac{T_B - T_D}{T_B A_G} = \frac{\eta_k}{A_G}$$

- Коэффициент необратимости

$$a = \left[ \frac{1}{\beta_B T_B T_+} + \frac{1}{\beta_D T_D T_-} + \frac{2(x_D - x_B)}{kr^2} \right] \frac{T_D}{A_G}$$

- Верхняя оценка производительности колонны бинарной ректификации

$$g_F = bq - aq^2$$

# Свойства зависимости производительности от затрат тепла

- Производительность максимальна при  $q^0 = \frac{b}{2a}$  и достигает значения  $g_F^m = \frac{b^2}{4a}$
- Участок от нуля до значения теплового потока, равного  $q^0$ , образует рабочую часть области реализуемых режимов колонны; дальнейшее увеличение потока теплоты в силу роста диссипации приводит к уменьшению производительности
- КПД колонны с учетом необратимости  $\eta = \frac{g_F}{q}$  для режима с предельной производительностью не зависит от необратимых факторов и равен 0,5
- Эффективный коэффициент массопереноса  $k$ , предполагается известным

# Модель процесса разделения трехкомпонентной смеси

- Используются две колонны бинарной ректификации
- Возможны два порядка разделения
  - **Прямой**, когда в первой колонне отделяют нулевой компонент, а во второй разделяют первый и второй. Соответствующие ему коэффициенты в параметрическом представлении каждой колонны имеют индекс 1; например,  $b_{11}$  - обратимый КПД при прямом порядке разделения для первой колонны
  - **Непрямой**, когда на первой ступени отделяют второй компонент, а оставшуюся смесь делят во второй колонне;  $b_{21}$  - обратимый КПД при непрямом порядке разделения для первой колонны

# Модель процесса разделения трехкомпонентной смеси

- Исходная смесь с концентрациями веществ  $x_0, x_1, x_2$ , где  $x_0$  - концентрация низкокипящего, а  $x_2$  - высококипящего
- Мольная теплота парообразования смеси низкокипящего и среднекипящего определяется как
$$r_{01} = (r_0 x_0 + r_1 x_1) / (x_0 + x_1)$$
- Каскад колонн характеризуется следующими параметрами ( $i$  - выбранный порядок разделения)
  - Коэффициент массопереноса для первой колонны  $k_{i1}$ ;
  - Коэффициент массопереноса для второй колонны  $k_{i2}$ ;
  - Коэффициенты теплопереноса для первой колонны, в кубе и дефлегматоре, соответственно  $\beta_{i1}^B, \beta_{i1}^D$ ;
  - Коэффициенты теплопереноса для второй колонны  $\beta_{i2}^B, \beta_{i2}^D$ ;

# Прямой порядок разделения

- Параметры первой колонны:

$$b_{11} = -\frac{T_1 - T_0}{RT_0 T_1 [x_0 \ln x_0 + (1 - x_0) \ln (1 - x_0)]}$$

$$a_{11} = -\left[ \frac{1}{\beta_{11}^B T_1^2} + \frac{1}{\beta_{11}^D T_0^2} + \frac{2}{k_{11} r_0^2} \right] \frac{1}{R [x_0 \ln x_0 + (1 - x_0) \ln (1 - x_0)]}$$

- Параметры второй колонны:

$$b_{12} = -\frac{T_2 - T_1}{RT_1 T_2 (x_1 \ln x_1 + x_2 \ln x_2)}$$

$$a_{12} = -\left[ \frac{1}{\beta_{12}^B T_2^2} + \frac{1}{\beta_{12}^D T_1^2} + \frac{2}{k_{12} r_1^2} \right] \frac{1}{R (x_0 \ln x_0 + x_2 \ln x_2)}$$

# Непрямой порядок разделения

- Параметры первой колонны:

$$b_{21} = -\frac{T_2 - T_1}{RT_2 T_1 [(x_0 + x_1) \ln(x_0 + x_1) + x_2 \ln x_2]}$$

$$a_{21} = -\left[ \frac{1}{\beta_{21}^B T_2^2} + \frac{1}{\beta_{21}^D T_1^2} + \frac{2}{k_{21} r_{01}^2} \right] \frac{1}{R [(x_0 + x_1) \ln(x_0 + x_1) + x_2 \ln x_2]}$$

- Параметры второй колонны:

$$b_{22} = -\frac{T_1 - T_0}{RT_1 T_0 (x_0 \ln x_0 + x_1 \ln x_1)}$$

$$a_{22} = -\left[ \frac{1}{\beta_{22}^B T_1^2} + \frac{1}{\beta_{22}^D T_0^2} + \frac{2}{k_{22} r_0^2} \right] \frac{1}{R (x_0 \ln x_0 + x_1 \ln x_1)}$$

# Максимальная производительность каскада

- Максимальная производительность каскада равна максимальной производительности первой колонны

$$g_F^* = \frac{b_{i1}^2}{4a_{i1}}$$

- В качестве первой целесообразно выбрать колонну, для которой максимальная производительность больше (значение коэффициента необратимости меньше), так как на нее поступает весь поток смеси, а обратимый КПД не зависит от кинетики

# Условия согласованности

- Колонны должны быть согласованы таким образом, чтобы максимальной производительности первой колонны по исходной смеси, соответствовала допустимая производительность второй по поступающему на нее двухкомпонентному потоку
- Для прямого порядка

$$\frac{b_{12}^2}{(1 - x_0)a_{12}} \geq \frac{b_{11}^2}{a_{11}}$$

- Для непрямого порядка

$$\frac{b_{22}^2}{(1 - x_2)a_{22}} \geq \frac{b_{21}^2}{a_{21}}$$

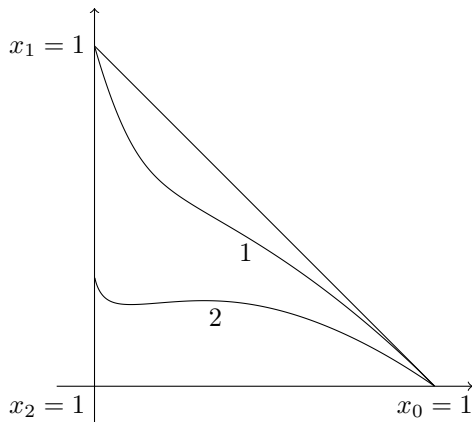


# Условия полной согласованности

- В оптимальном случае максимальной производительности первой колонны по исходной смеси должна соответствовать максимальная производительность второй колонны по поступающему на нее потоку двухкомпонентной смеси
- Условия согласованности превращаются в равенства
- Из условий полной согласованности следует

$$a_{12} = a_{11} \frac{b_{12}^2}{b_{11}^2(1 - x_0)}, \quad a_{22} = a_{21} \frac{b_{21}^2}{b_{22}^2(1 - x_2)}$$

# Обратимая оценка производительности каскада



- Для прямого порядка

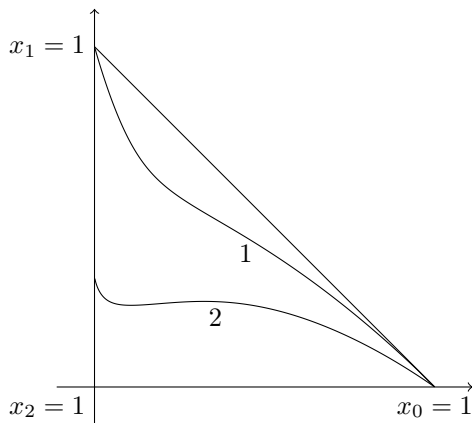
$$g_F = \frac{b_{11}b_{12}(q_1 + q_2)}{b_{12} + b_{11}(1 - x_0)}$$

- Для непрямого порядка

$$g_F = \frac{b_{21}b_{22}(q_1 + q_2)}{b_{22} + b_{21}(1 - x_2)}$$

- Предпочтительный порядок зависит от состава смеси (кривая 1 на рис.)

# Оценка затрат тепла для каскада с учетом необратимости



- Для первой колонны

$$q_{i1} = \frac{b_{i1} - \sqrt{b_{i1}^2 - 4a_{i1}g_F}}{2a_{i1}}$$

- Для второй колонны

$$q_{i2} = \frac{b_{i2} - \sqrt{b_{i2}^2 - 4a_{i2}g_F(1 - x^i)}}{2a_{i2}}$$

- Предпочтительный порядок зависит от состава смеси и кинетики (кривая 2 на рис.)

# Необратимая оценка производительности каскада в случае полной согласованности

- Для прямого порядка

$$g_F = \frac{b_{11}b_{12}}{b_{12} + b_{11}(1 - x_0)}(q_1 + q_2) - \frac{a_{11}b_{12}}{b_{12} + b_{11}(1 - x_0)}(q_1 + q_2)^2$$

- Для непрямого порядка

$$g_F = \frac{b_{21}b_{22}}{b_{22} + b_{21}(1 - x_2)}(q_1 + q_2) - \frac{a_{21}b_{22}}{b_{22} + b_{21}(1 - x_2)}(q_1 + q_2)^2$$

# Условия превалирования одного из порядков разделения

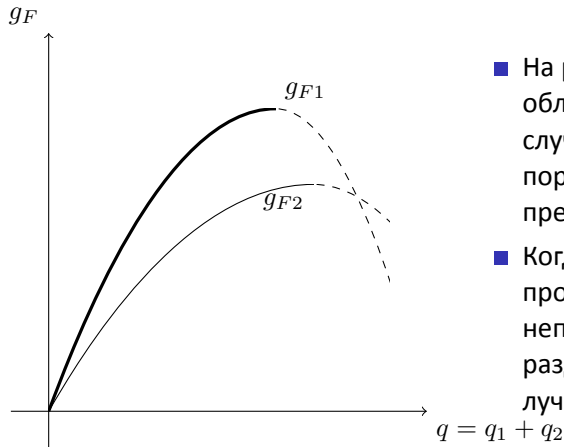
- Прямой порядок разделения заведомо выгоднее непрямого при одновременном соблюдении двух неравенств:

$$\frac{b_{11}b_{12}}{b_{12} + b_{11}(1 - x_0)} > \frac{b_{21}b_{22}}{b_{22} + b_{21}(1 - x_2)}$$

$$\frac{b_{11}^2 b_{12}}{a_{11} [b_{12} + b_{11}(1 - x_0)]} \geq \frac{b_{21}^2 b_{22}}{a_{21} [b_{22} + b_{21}(1 - x_2)]}$$

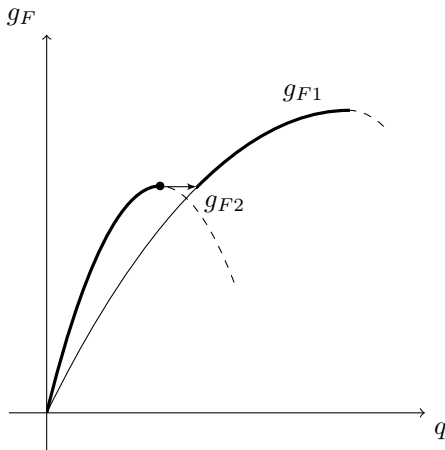
- Одно из неравенств обязательно должно быть строгим
- Первое из неравенств означает, что обратимый КПД для прямого порядка не меньше, чем для непрямого, второе соответствует такому же соотношению для предельных производительностей

# Полное превалирование одного порядка над другим



- На рис. показаны границы областей достижимости в случае, когда прямой порядок разделения превалирует над непрямым
- Когда знаки неравенств противоположные, не прямой порядок разделения заведомо лучше прямого

# Превалирование, зависящее от производительности



- Если неравенства в условиях превалирования имеют различные знаки, то оптимальный порядок разделения зависит от производительности
- Граница области реализуемости каскада представляет собой в этом случае максимум из границ, построенных для каждого порядка разделения (на рис.):

$$g_F = \max(g_{F1}, g_{F2})$$

# Расчет эффективных значений параметров, определяющих множество реализуемости колонны

## ■ Эффективный коэффициент массопереноса

$$k = \frac{q(x_D - x_B)}{Rr(l_1 - l_2 - l_3)}$$

Величины  $l$  зависят от производительности, концентраций и коэффициентов относительной летучести  $\alpha$ ;  $R$  - газовая постоянная

## ■ Коэффициент необратимости и обратимый КПД

$$a = \frac{q_1 g_{F2} - q_2 g_{F1}}{q_1 q_2 (q_1 - q_2)}, \quad b = \frac{g_{F1}}{q_1} + a q_1$$

## ■ Флегмовое число

$$R = \frac{q(g_F)}{g_F x_F r} - 1 = \frac{b - \sqrt{b^2 - 4ag_F}}{2ag_F x_F r} - 1$$



- Показано, что оценка производительности колонны бинарной ректификации, в функции затрат теплоты имеет форму выпуклой вверх параболы и характеризуется двумя характеристическими параметрами: обратимым КПД и коэффициентом необратимости
- Через эти параметры выражена предельная производительность колонны и КПД, соответствующий предельной производительности
- Показано, как на значения этих параметров влияют характеристики смеси и кинетические коэффициенты тепло и массопереноса

- Предложена процедура уточнения характеристических параметров по данным измерений на действующей колонне
- Решена задача о выборе последовательности разделения смеси из трех компонентов по условию минимума суммарных затрат теплоты в каскаде из двух колонн
- Показано, что на порядок разделения влияет не только кинетика массо-, но и теплообмена в колоннах
- Предложена процедура расчета порядка разделения