# Область реализуемых нагрузок бинарной ректификации и последовательность разделения трехкомпонентной смеси

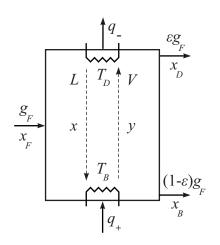
И.А. Сукин

9 декабря 2013 г.

#### Введение

- 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
- lacksquare доля отбора

#### Основные допущения

- Массообмен между паром и флегмой эквимолярный
- 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

$$\mathbf{q}_{+}-\mathbf{q}_{-}+\mathbf{g}_{\scriptscriptstyle{\mathrm{F}}}\mathbf{h}_{\scriptscriptstyle{\mathrm{F}}}-\mathbf{g}_{\scriptscriptstyle{\mathrm{F}}}arepsilon\mathbf{h}_{\scriptscriptstyle{\mathrm{D}}}-\mathbf{g}_{\scriptscriptstyle{\mathrm{F}}}(1-arepsilon)\mathbf{h}_{\scriptscriptstyle{\mathrm{B}}}=0$$

■ Энтропийный баланс

$$g_{\scriptscriptstyle F} s_{\scriptscriptstyle F} - g_{\scriptscriptstyle F} \varepsilon s_{\scriptscriptstyle D} - g_{\scriptscriptstyle F} (1 - \varepsilon) s_{\scriptscriptstyle B} + \frac{q_+}{T_B} - \frac{q_-}{T_D} + \sigma = 0$$

 $lacktriangledown \sigma > 0$  - 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:

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

- lacktriangle Работа разделения Гиббса:  $A_{\it G} = A_{\it F} arepsilon A_{\it D} (1-arepsilon) A_{\it B}$
- КПД Карно:  $\eta_{\kappa} = (1 T_D/T_B)$
- Итоговая зависимость:

$$g_F = q \frac{\eta_{\mathsf{K}}}{\mathsf{A}_{\mathsf{G}}} - \sigma(q, g_F) \frac{\mathsf{T}_{\mathsf{D}}}{\mathsf{A}_{\mathsf{G}}}$$

#### Вклад теплообмена в необратимость

 Потоки теплоты в кубе и дефлегматоре пропорциональны разности температур

$$q = rV = \beta_{\scriptscriptstyle B}(T_+ - T_{\scriptscriptstyle B}) = \beta_{\scriptscriptstyle D}(T_D - T_-)$$

 Производство энтропии за счет тепловых процессов в кубе и дефлегматоре равно

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

■ 3десь 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

$$\sigma_g \geq \frac{2(\mathsf{x}_\mathsf{D} - \mathsf{x}_\mathsf{B})q^2}{\mathsf{k} r^2}$$

• 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

$$a = \left[\frac{1}{\beta_{\rm B} T_{\rm B} T_{+}} + \frac{1}{\beta_{\rm D} T_{\rm D} T_{-}} + \frac{2({\it x}_{\rm D} - {\it x}_{\rm B})}{{\it k} r^{2}}\right] \frac{T_{\rm D}}{A_{\rm G}}$$

 Верхняя оценка производительности колонны бинарной ректификации

$$g_F = bq - aq^2$$

### Свойства зависимости производительности от затрат тепла

- lacktriangledown Производительность максимальна при  $q^0=rac{b}{2a}$  и достигает значения  $g_{\scriptscriptstyle F}^m=rac{b^2}{4a}$
- 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 0,5b
- 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<sub>11</sub> 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<sub>21</sub> 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  $eta^{ extbf{ ilde{B}}}_{i2}$ ,  $eta^{ extbf{ ilde{D}}}_{i2}$ ;

#### Прямой порядок разделения

Параметры первой колонны:

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

■ Параметры второй колонны:

$$\begin{split} b_{12} &= -\frac{\mathit{T}_2 - \mathit{T}_1}{\mathit{RT}_1 \mathit{T}_2(\mathit{x}_1 \ln \mathit{x}_1 + \mathit{x}_2 \ln \mathit{x}_2)} \\ a_{12} &= -\left[\frac{1}{\beta_{12}^{\mathit{B}} \mathit{T}_2^2} + \frac{1}{\beta_{12}^{\mathit{D}} \mathit{T}_1^2} + \frac{2}{\mathit{k}_{12} \mathit{r}_1^2}\right] \frac{1}{\mathit{R}(\mathit{x}_0 \ln \mathit{x}_0 + \mathit{x}_2 \ln \mathit{x}_2)} \end{split}$$

#### Непрямой порядок разделения

Параметры первой колонны:

$$b_{21} = -\frac{T_2 - T_1}{RT_2T_1\left[\left(x_0 + x_1\right)\ln\left(x_0 + x_1\right) + x_2\ln x_2\right]}$$

$$a_{21} = -\left[\frac{1}{\beta_{21}^BT_2^2} + \frac{1}{\beta_{21}^DT_1^2} + \frac{2}{k_{21}r_{01}^2}\right] \frac{1}{R\left[\left(x_0 + x_1\right)\ln\left(x_0 + x_1\right) + x_2\ln x_2\right]}$$

Параметры второй колонны:

$$\begin{split} b_{22} &= -\frac{T_1 - T_0}{RT_1T_0(x_0\ln x_0 + x_1\ln x_1)} \\ a_{22} &= -\left[\frac{1}{\beta_{22}^BT_1^2} + \frac{1}{\beta_{22}^DT_0^2} + \frac{2}{k_{22}r_0^2}\right] \frac{1}{R(x_0\ln x_0 + x_1\ln x_1)} \end{split}$$

#### 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

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

Для непрямого порядка

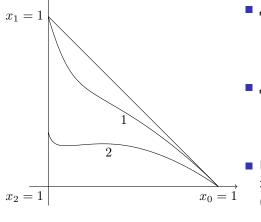
$$\frac{b_{22}^2}{(1-x_2)a_{22}} \ge \frac{b_{21}^2}{a_{21}}$$

#### 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

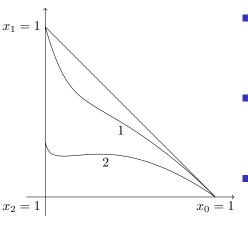
$$g_{F} = rac{b_{11}b_{12}(q_{1}+q_{2})}{b_{12}+b_{11}(1-x_{0})}$$

■ 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

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

■ 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

$$g_{ extsf{F}} = rac{b_{11}b_{12}}{b_{12} + b_{11}(1 - extsf{x}_0)}(q_1 + q_2) - rac{a_{11}b_{12}}{b_{12} + b_{11}(1 - extsf{x}_0)}(q_1 + q_2)^2$$

Для непрямого порядка

$$g_{\it F} = rac{b_{21}b_{22}}{b_{22}+b_{21}(1-{\it x}_2)}(q_1+q_2) - rac{a_{21}b_{22}}{b_{22}+b_{21}(1-{\it x}_2)}(q_1+q_2)^2$$

## Условия превалирования одного из порядков разделения

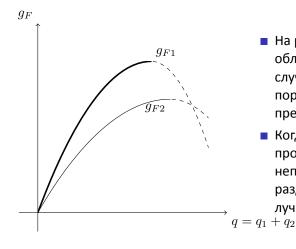
 Прямой порядок разделения заведомо выгоднее непрямого при одновременном соблюдении двух неравенств:

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

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

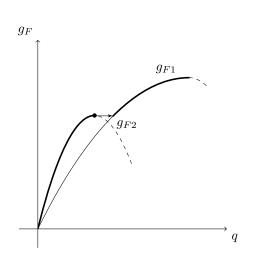
- Одно из неравенств обязательно должно быть строгим
- Первое из неравенств означает, что обратимый КПД для прямого порядка не меньше, чем для непрямого, второе соответствует такому же соотношению для предельных производительностей

#### 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, непрямой 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.):

$$g_F = \max(g_{F1}, g_{F2})$$
23 / 26

# Расчет эффективных значений параметров, определяющих множество реализуемости колонны

■ Эффективный коэффициент массопереноса

$$k = \frac{q(x_D - x_B)}{Rr(I_1 - I_2 - I_3)}$$

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

■ Коэффициент необратимости и обратимый КПД

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

Флегмовое число

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

#### Результаты

- 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 коэффиценты тепло и массопереноса

#### Результаты

- 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