

ОСОБЕННОСТИ ПОСТАНОВКИ И РЕШЕНИЯ ПРОЕКТНОЙ И ПОВЕРОЧНОЙ ЗАДАЧ НА ПРИМЕРЕ РАСЧЕТА РЕКТИФИКАЦИИ БИНАРНОЙ СМЕСИ

М.К. Захаров[@], профессор, Ю.А. Писаренко, профессор

Кафедра процессов и аппаратов химической технологии

им. Н.И. Гельперина,

Кафедра химии и технологии основного органического синтеза

МИТХТ им. М.В. Ломоносова, Москва, 119571 Россия

[@]Автор для переписки, e-mail: mkzakharov@gmail.com

Проанализированы различия в постановке задач проектного и поверочного расчетов процесса ректификации бинарных смесей. Показано, что при поверочном расчете практически не удается обеспечить равенство составов исходной смеси и жидкости на тарелке питания. Названы причины несоблюдения этого неравенства и предложен путь достижения корректного расчета.

Ключевые слова: *ректификация, число степеней свободы, проектный расчет, поверочный расчет, место тарелки питания.*

FEATURES OF SETTING UP AND SOLVING THE DESIGN AND VERIFICATION TASKS ON THE EXAMPLE CALCULATION OF RECTIFICATION OF A BINARY MIXTURE

M.K. Zakharov[@], Yu.A. Pisarenko

M.V. Lomonosov Moscow State University of Fine Chemical Technologies,

Moscow, 119571 Russia

[@]Corresponding author e-mail: mkzakharov@gmail.com

Various variants of setting up the rectification simulation task (verification task and design task) were considered with the distillation of binary mixtures as an example. Based on the analysis of degrees of freedom the interrelation between the character of the simulation problem and the types of operating parameters was determined. It is shown that, when dealing with the verification task, it is necessary to exclude a dramatic difference in the properties of the initial mixture and the liquid phase located on a feed plate.

Keywords: *rectification, degrees of freedom, verification task, design task, operating parameters, location of feed plate.*

Процесс ректификации является одним из наиболее энергоемких методов разделения жидких смесей. Затраты энергии на процесс ректификации определяются в основном количеством тепловой энергии, подводимой к кипятильнику ректификационной колонны. Выбор оптимального варианта ведения процесса с минимальными суммарными приведенными затратами, учитывающими все расходы на осуществление процесса, сопровождается, как правило, численным моделированием с использованием различных программных продуктов.

Возможны различные варианты постановки задачи расчета ректификационной колонны: проектная, когда необходимо определить размеры ап-

парата и режимные характеристики процесса при заданной степени разделения исходной смеси; поверочная — при известных размерах колонны и характеристиках процесса требуется оценить состав продуктовых потоков (куба и дистиллята) и проектно-поверочная, сочетающая в себе элементы проектной и поверочной задач.

Определение числа независимых переменных (числа степеней свободы) химико-технологических объектов, в том числе ректификационных колонн непрерывного действия, является принципиальной задачей, решение которой необходимо при выполнении математического моделирования и оптимизации химико-технологических процессов. Данная

задача достаточно подробно рассмотрена в работах [1–6]. Так, в [6] показано, что число степеней свободы независимых переменных инвариантно относительно метода расчета процесса ректификации (проектного, поверочного или проектно-поверочного).

Анализ степеней свободы в современных программных комплексах, предназначенных для расчета химико-технологических систем (ХТС), происходит в автоматическом режиме и практически скрыт от пользователя. Помимо этого часть степеней свободы фиксируется без его ведома, в режиме «по умолчанию», например, потери тепловой энергии на тарелках, температура поступающей в колонну флегмы, КПД тарелок и др. Такая ситуация с одной стороны упрощает действия инженера-расчетчика, а с другой — часто не позволяет ему полностью раскрыть возможности моделируемого объекта. Поэтому подробный анализ числа степеней свободы различного оборудования и способов их закрепления (спецификации расчетной задачи) представляется с нашей точки зрения весьма полезным для выбора оптимального режима работы технологической установки.

Рассматривая процесс ректификации, следует отметить, что использование степеней свободы колонны при различной постановке задачи ее расчета имеет свою специфику. В связи с этим, цель данной работы состоит в том, чтобы в рамках различной постановки задачи расчета ректификации установить взаимосвязь между типом фиксируемых переменных (спецификацией задачи) и самой процедурой расчета. Прежде чем перейти к анализу подобной взаимосвязи, рассмотрим общий подход, отражающий характер соответствия между фиксируемыми рабочими параметрами колонны и числом степеней ее свободы при проектной и поверочной постановках задачи.

Рассмотрим простую ректификационную колонну, включающую N ступеней разделения, парциальный кипятильник, а также полный конденсатор, одновременно выполняющий функцию отделителя флегмы, рис. 1. В этом случае число степеней свободы равно [3]: $C + 2N + 9$.

Закрепление режимных и конструктивных параметров процесса ректификации, число которых совпадает с числом степеней свободы, позволяет зафиксировать режим работы колонны, то есть, определить остальные его характеристики. В табл. 1 приведены варианты спецификации переменных при различных способах постановки задачи расчета. При этом режим работы колонны, определяемый набором фиксируемых рабочих параметров (в соответствии с табл. 1) в общем случае не является оптимальным, что, в частности, может проявляться в резком различии состава жидкости на тарелке питания и

исходной смеси при поверочной задаче расчета. Таким образом, задача оценки числа рабочих параметров, которые необходимо задать, чтобы зафиксировать режим работы колонны и задача оптимизации режима работы ректификационной колонны являются самостоятельными и для своего решения требуют использования различных подходов.

В то же время элементы оптимизации могут быть представлены и на этапе выбора рабочих параметров колонны с целью закрепления ее рабочего режима. Так, при проектной постановке задачи расчета набор закрепляемых рабочих параметров, приведенных в табл. 1, соответствует стандартной процедуре расчета бинарной ректификации методом McCabe и Thiele. В этом случае, как видно из условия, приведенного в табл. 1, обеспечивается режим обратимого смешения исходной смеси с жидкостью, расположенной на тарелке питания.

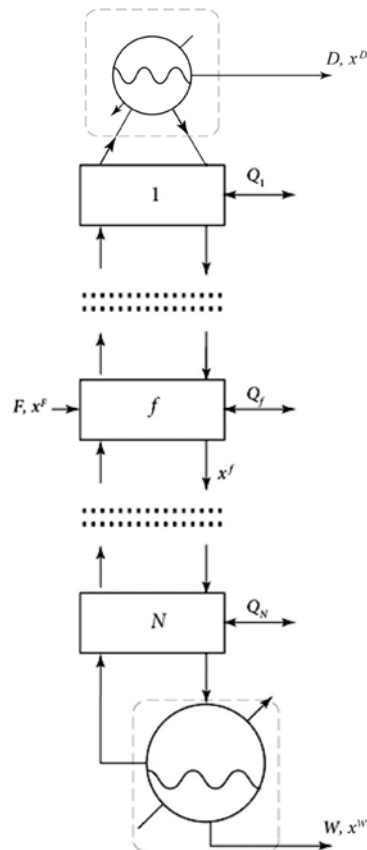


Рис. 1. Структура ректификационной колонны.

Подробное расчетное исследование различий в результатах расчетов при проектной и поверочной постановках задачи выполнено нами на примере разделения бинарной смеси бензол–толуол с использованием программы Aspen Plus®.

В соответствии с табл. 1 при проектном расчете бинарной ректификации обычно задают свойства потока питания (его величину F , давление p^F , температуру T^F , и состав x^F), а также составы верхне-

го (x^D) и нижнего (x^W) продуктовых потоков. Сами же величины продуктовых потоков дистиллята D и куба W определены в данном случае уравнениями материального баланса. Помимо этого, при стандартной постановке проектной задачи [7], полагают отсутствие теплотерь на тарелках колонны, принимают одинаковое давление вдоль всей колонны, в том числе в кубе и дефлегматоре, а также полагают

температуру флегмы равной температуре кипения дистиллята. Также полагают, что состав жидкости на тарелке питания совпадает с составом подаваемой на нее исходной смеси $x_1^F = x_1^I$. В результате принятых допущений, как это следует из табл. 1, остается одна независимая переменная (одна степень свободы), в качестве которой рассматривают флегмовое число R .

Таблица 1. Закрепляемые параметры в процессе расчета бинарной ректификации

Поверочная постановка задачи	Проектная постановка задачи	Число закрепляемых параметров
Количество и состояние питания (состав, температура, давление)	Количество и состояние питания (состав, температура, давление)	$C + 2$
Общее число тарелок (N)	Состав дистиллята	1
Положения тарелки питания	Состав куба	1
Давления на тарелках	Давления на тарелках	N
Давление в кипятыльнике и конденсаторе	Давление в кипятыльнике и конденсаторе	2
Величина тепловых потоков на тарелках	Величина тепловых потоков на тарелках	N
Соотношение продуктовых потоков (D/W)	Условие: в случае бинарной ректификации состав жидкости на тарелке питания совпадает с составом исходной смеси $x^F = x^I$; если разделяют многокомпонентную смесь, то данное условие можно сформулировать в виде требования равенства температуры кипения на тарелке питания и температуры исходной смеси, подаваемой в колонну.	1
Флегмовое число	Флегмовое число*)	1
Температура флегмы	Температура флегмы	1
Общее число закрепляемых параметров		$C + 2N + 9$

*) При проектной постановке задачи нижней границей интервала изменения флегмового числа является минимальное флегмовое число $R_{\min}$.

При поставленной таким образом проектной задаче расчета процесса ректификации бинарной смеси и необходимое число теоретических тарелок (и реальных – тоже, с учетом их к.п.д.), и затраты теплоты в кипятыльнике (и хладоагента – в конденсаторе) зависят лишь от величины флегмового числа. В частности, введенное в ряде учебников и научных работах [8–11] паровое число, равное отношению потока пара в колонне к потоку отводимого кубового остатка, также не является независимой характеристикой процесса ректификации, – значение его определено величиной флегмового числа R [7].

Последовательность решения проектной задачи, в соответствии с методом McCabe и Thiele, наглядно проиллюстрирована на рис. 1. Метод заключается в построении рабочих линий [12] (называемых иногда [13] линиями концентраций) для укрепляющей и отгонной частей колонны и расчете числа теоретических тарелок по количеству прямоугольных треугольников, расположенных между ними и рав-

новесной линией и опирающихся гипотенузами на рабочие линии. Рабочие линии представляют собой связь между составами паровой и жидкой фаз в любом сечении колонны, получаемую на основе балансовых соотношений. Из точки A , расположенной на диагонали с абсциссой x^D , под углом α ($\operatorname{tg} \alpha = \frac{R}{R+1}$) проводят рабочую линию, соответствующую укрепляющей секции, до ее пересечения с вертикалью x^F в точке B . Рабочую линию отгонной секции – BC проводят через точку B в точку C , лежащую на диагонали с абсциссой x^W . Число теоретических тарелок (ступеней) определяют по числу треугольников n_y и n_o , расположенных соответственно между равновесной кривой и рабочими линиями: AB для укрепляющей и BC – отгонной секций. Затраты теплоты в кипятыльнике Q_k на процесс ректификации определяют из теплового баланса колонны, они в значительной степени зависят от флегмового числа R [12,13].

В то же время при поверочном расчете бинарной ректификации, осуществляемом с помощью Aspen

Plus[®], также задают свойства потока питания (его величину F , давление p^F , температуру T^F , и состав x_1^F), число теоретических тарелок в укрепляющей (n_y) и отгонной (n_o) секциях, флегмовое число R и поток дистиллята D . Помимо этого, считают, что теплотерии на тарелках колонны отсутствуют, принимают одина-

ковое давление вдоль всей колонны, в том числе в кубе и дефлегматоре, а также полагают температуру флегмы равной температуре кипения дистиллята. Как видим (см. табл. 1), общее число фиксируемых переменных при этом то же, что и при постановке проектной задачи — оно совпадает с числом степеней свободы.

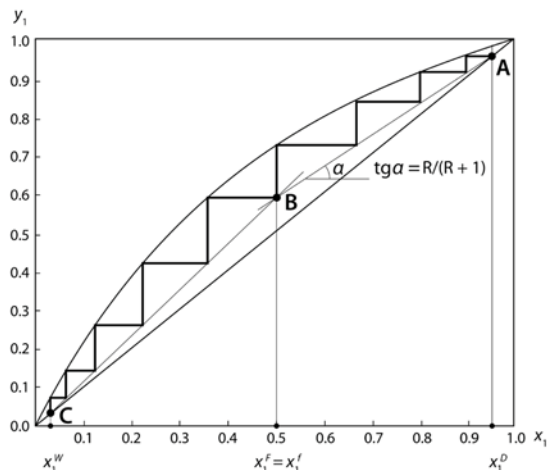


Рис. 2. Порядок расчета бинарной ректификации в соответствии с методом McCabe и Thiele.

Как видим, в проектной задаче, в отличие от проверочной, отбор дистиллята исключают из числа фиксируемых переменных, поскольку при проведении расчета вводится дополнительное условие, в соответствии с которым полагают состав жидкости на тарелке питания равным составу исходной смеси. При этом количество дистиллята перестает быть свободной переменной и фиксировать его уже невозможно.

Исходя из условия равенства составов на тарелке питания и исходной смеси (условие равенства составов), можно видоизменить классическую процедуру расчета бинарной ректификации, соответствующую методу McCabe и Thiele. Полагаем, что условие задачи расчета соответствует ее проверочной постановке с той лишь разницей, что переменную, характеризующую количество отбираемого дистиллята мы исключаем из числа варьируемых, вводя дополнительное условие равенства составов исходной смеси и жидкой фазы на тарелке питания. Тогда, имея состав питания x_1^F , и рассчитав флегмовое число R , (а значит и тангенс угла наклона рабочей линии укрепляющей колонны, равный $\frac{R}{R+1}$), подбираем такое положение рабочей линии, чтобы уложилось заданное число теоретических тарелок n_y в укрепляющей секции. Абсцисса точки пересечения данной линии с диагональю, проведенной в диаграмме фазового равновесия, даст состав дистиллята x_1^D . Обозначим буквой B точку пересечения построенной нами рабочей линии укрепляющей секции с вертикалью, проведенной через точку состава питания x_1^F . Из точки B проводим рабочую линию отгонной секции таким образом, чтобы в

ней получилось заданное число теоретических тарелок n_{om} . Абсцисса точки пересечения данной линии с диагональю даст состав кубового продукта x_1^W . При известных составах исходной смеси x_1^F и продуктовых потоков x_1^D и x_1^W , по уравнению материального баланса колонны может быть определен поток дистиллята D , так же как и количество отбираемого кубового продукта W . Таким образом, приведенные выше рассуждения еще раз показывают, что дополнительно введенное условие равенства составов позволяет сократить число рабочих параметров колонны. В частности, число переменных, соответствующих проверочной постановке задачи, уменьшается при этом на единицу — из числа таковых можно, например, исключить количество отбираемого продуктового потока — дистиллята D или куба W . Отметим, что поскольку при постановке задачи нами частично использовался набор рабочих параметров характерный для проверочной задачи (числа тарелок в укрепляющей и исчерпывающей части и др.), а также условие равенства составов на тарелке питания, характерное для проектной задачи, то разумно определить данную задачу как проектно-проверочную.

В то же время, фиксируя свободную переменную D при проверочном расчете, мы, как правило, нарушаем требование о равенстве составов на тарелке питания и исходной смеси, то есть, в общем случае получаем неоптимальное расположение уровня подачи питания. Корректировку положения тарелки питания при этом проводят посредством серии проверочных расчетов для обеспечения максимальной степени разделения.

Выполненные с использованием Aspen Plus® расчеты с варьируемым потоком дистиллята D подтвердили этот вывод. А именно: режимы работы колонны с произвольным (принятым) отбором дистиллята, как правило, далеки от оптимального, рис. 3 а,в. Последним следует считать такой, при котором состав исходной смеси совпадает (или близок) к составу жидкости на тарелке питания, рис. 3 б. В других случаях происходит смешение жидкостей разных составов, что противоречит цели ректификации и значительно ухудшает разделяющую способность колонны. На рис. 3 представлены полученные с помощью Aspen Plus® рабочие линии (построены по рабочим составам контактирующих жидкости и пара). Видно, что при заданном числе тарелок в отгонной и укрепляющей колоннах (5 и 4 соответственно) лишь при половинном (от исходной смеси) отборе дистиллята состав жидкости на тарелке питания x_i^f близок к составу исходной смеси (рис. 3 б).

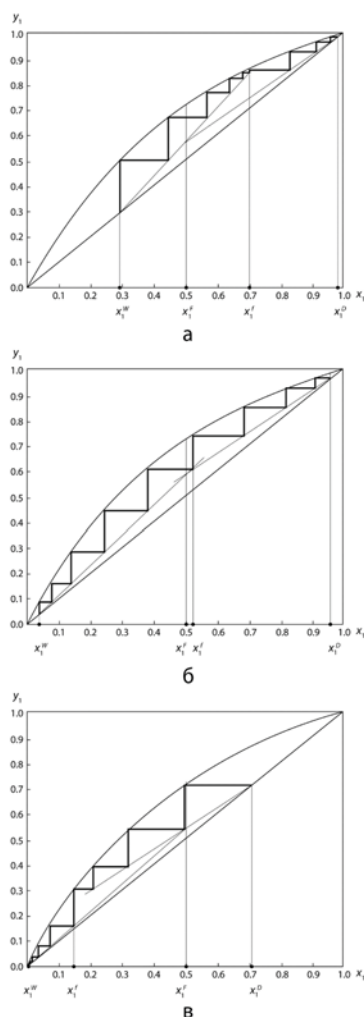


Рис. 3. Варианты численного моделирования бинарной ректификации: а – тарелка питания находится выше оптимального уровня подачи питания; б – тарелка питания расположена вблизи оптимального уровня; в – тарелка питания расположена ниже оптимального уровня.

Варьированием доли отбора дистиллята можно добиться полного равенства составов: $x_i^F = x_i^f$. Диаграммы подобного рода использованы рядом исследователей для выбора места расположения тарелки питания [11, 14].

Результаты расчетов, полученные при существенном различии x_i^F и x_i^f (рис. 3 а,в), вряд ли могут представлять практический интерес. Наибольшее разделение имеет место, естественно, в отсутствие различия между x_i^F и x_i^f . В рассматриваемом расчете (см. табл. 2) это соответствует доле отбора дистиллята, равной 0.5. Разность концентраций бензола в продуктах разделения составляет 0.928. При наличии смешения эта разность составляет 0.692 и 0.709 при доле отбора дистиллята соответственно 0.3 и 0.7. Поэтому перед анализом полученных результатов расчета следует убедиться в отсутствии смешения на тарелке питания жидкостей разных составов. Об этом, естественно, нужно помнить и при расчете процессов ректификации многокомпонентных смесей.

Таблица 2. Концентрации бензола в продуктах разделения

Доля отбора дистиллята (D/F)	Дистиллят, мол. доли	Нижний продукт, мол.доли	Четкость разделения – разность концентраций
0.3	0.984	0.292	0.692
0.5	0.964	0.036	0.928
0.7	0.713	0.004	0.709

Заключение

Анализ полученных результатов расчета показал, что несмотря на огромные возможности программного пакета Aspen Plus, практически всегда при выполнении поверочного расчета задачи разделения бинарной смеси не обеспечивается равенство составов исходной смеси и жидкости на тарелке питания. Очевидны, по крайней мере, две причины такого дисбаланса: 1 – использование целых (не дробных) чисел теоретических тарелок в каждой секции (укрепляющей и отгонной) колонны; 2 – сложность правильного выбора соотношения продуктовых потоков из-за незнания точных конечных составов продуктов разделения. Таким образом, только полное соблюдение условий материального баланса и отсутствие различий в составах исходной бинарной смеси и жидкости на тарелке питания являются гарантом корректного расчета.

Список литературы:

1. Gilliland S.R., Reed C.F. // Eng. Chem. 1942. V. 34. № 5. P. 551.

2. Бенедек П., Ласло А. Научные основы химической технологии / Пер. с нем. под ред. П.Г. Романкова, М.И. Курочкиной. Л.: Химия, 1970. 367 с.
3. Kwauk M. Specification of Design Variables // In: Henley E.J., Seader J.D. Equilibrium Stage Separation Operations in Chemical Engineering. NY: JonWiley&Sons, 1956. 239 p.
4. Лощев А.Г., Кардона К.А., Писаренко Ю.А. // Теор. основы хим. технологии. 2010. Т. 44. № 5. С. 543–555.
5. Лощев А.Г., Алексанова Е.А., Кардона К.А., Писаренко Ю.А. // Теор. основы хим. технологии. 2014. Т. 48. № 1. С. 112–121.
6. Фролкова А.К., Хахин Л.А. // Хим. технология. 2009. Т. 10. № 4. С. 237–245.
7. Захаров М.К. // Вестник МИТХТ. 2012. Т. 7. № 3. С. 22–24.
8. Скобло А.И., Молоканов Ю.К., Владимиров А.И., Щелкунов В.А. Процессы и аппараты нефтегазопереработки и нефтехимии. М.: Издательский центр РГУ нефти и газа имени Губкина, 2012. 726 с.
9. Львов С.В. Некоторые вопросы ректификации бинарных и многокомпонентных смесей. М.: АН СССР, 1960. 163 с.
10. Комиссаров Ю.А., Гордеев Л.С., Вент Д.П. Научные основы процессов ректификации: в 2-х т. / Под ред. Л.А. Серафимова. М.: Химия, 2004. 270 с.
11. Хахин Л.А. Разработка энтропийной оценки работы ректификационных колонн и функциональных комплексов; дис. ... канд. техн. наук. М.: МИТХТ, 2009. 219 с.
12. Айнштейн В.Г., Захаров М.К., Носов Г.А., Захаренко В.В., Зиновкина Т.В., Таран А.Л., Костанян А.Е. Общий курс процессов и аппаратов химической технологии: учебник. В 2-х кн. / Под ред. В.Г. Айнштейна. М.: Логос; Высшая школа, 2006. 1760 с.
13. Багатуров С.А. Основы теории и расчета перегонки и ректификации. М.: Химия, 1974. 440 с.
14. Kister H.Z. Distillation Design. McGraw-Hill, Inc., 1992. 710 p.
- Kurochkina. L.: Khimiya, 1970. 367 p.
3. Kwauk M. Specification of Design Variables // In: Henley E.J., Seader J.D. Equilibrium Stage Separation Operations in Chemical Engineering. NY: JonWiley&Sons, 1956. 239 p.
4. Loshchev A.G., Kardona K.A., Pisarenko Yu.A. // Teor. osnovy him. tekhnologii (Theoretical Foundations of Chemical Engineering). 2010. V. 44. № 5. P. 543–555.
5. Loshchev A.G., Aleksanova E.A., Kardona K.A., Pisarenko Yu.A. // Teor. osnovy him. tekhnologii (Theoretical Foundations of Chemical Engineering). 2014. V. 48. № 1. P. 112–121.
6. Frolova A.K., Khakhin L.A. // Khim. Tekhnologiya (Chemical Technology). 2009. V. 10. № 4. P. 237–245.
7. Zakharov M.K. // Vestnik MITHT (Fine Chem. Tech.). 2012. V. 7. № 3. P. 22–24.
8. Skoblo A.I., Molokanov Yu.K., Vladimirov A.I., Shchelkunov V.A., Processy i apparaty neftegazopererabotki i neftekhimii (Processes and equipment for oil & gas and petrochemical). M.: Izdatel'skij centr RGU nefti i gaza imeni Gubkina, 2012. 726 p.
9. L'vov S.V. Nekotorye voprosy rektifikatsii binarnykh i mnogokomponentnykh smesey (Some of the issues of rectification of binary and multicomponent mixtures). M.: AN USSR, 1960. 163 p.
10. Komissarov Yu.A., Gordeev L.S., Vent D.P. Nauchnye osnovy processov rektifikatsii: v 2-h t. (The scientific basis of distillation: in 2 vol.) / Ed. by L.A. Serafimov. M.: Khimiya, 2004. 270 p.
11. Khakhin L.A. The development of the entropy evaluation of the distillation columns and functional complexes: PhD dissertation. M.: MITHT, 2009. 219 p.
12. Ainshtein V.G., Zakharov M.K., Nosov G.A., Zakharenko V.V., Zinovkina T.V., Taran A.L., Kostanyan A.E. Obshchij kurs processov i apparatov himicheskoy tekhnologii: uchebnik. V 2-h kn. (The general course of processes and apparatuses of chemical technology: a textbook. In two books) / Ed. by V.G. Ainshtein. M.: Logos; Vysshaya shkola, 2006. 1760 p.
13. Bagaturov S.A. Osnovy teorii i rascheta peregonki i rektifikatsii (Fundamentals of theory and calculation of distillation and rectification). M.: Khimiya, 1974. 440 p.
14. Kister H.Z. Distillation Design. McGraw-Hill, Inc., 1992. 710 p.

References:

1. Gilliland S.R., Reed C.F. // Eng. Chem. 1942. V. 34. № 5. P. 551.
2. Benedek P., Laslo A. Nauchnye osnovy khimicheskoy tekhnologii (Scientific foundations of chemical technology) // Ed. by P.G. Romankov, M.I.