

На правах рукописи

Дам Куанг Шанг

**Разработка математических моделей
многокомпонентной ректификации с
созданием базы данных и программного
комплекса**

Специальность 05.17.08 – Процессы и аппараты химических технологий

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Москва – 2012

Работа выполнена в ФГБОУ ВПО «Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева» на кафедре «Электротехники и электроники»

Научный руководитель: Доктор технических наук, профессор
Комиссаров Юрий Алексеевич

Официальные оппоненты: Доктор технических наук, профессор кафедры химии и технологии основного органического синтеза Московского университета тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова
Писаренко Юрий Андрианович

Доктор технических наук, доцент, научный консультант ФГУП «ИРЕА»
Бельков Валерий Петрович

Ведущая организация: Новомосковская акционерная компания «Азот»

Защита состоится «05» апреля 2012 г. в 13:30 часов в конференц-зале на заседании диссертационного совета Д 212.204.03 в РХТУ им. Д.И.Менделеева по адресу: 125047, г. Москва, Миусская пл., д. 9.

С диссертацией можно ознакомиться в научно-информационном центре РХТУ имени Д.И. Менделеева по адресу: 125047 Москва, Миусская пл., д. 9.

Автореферат разослан «____» _____ 2012 г.

Ученый секретарь диссертационного совета, к.т.н., доцент

А.В. Женса

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. Из типовых процессов химической технологии, процесс ректификации по энергопотреблению является самым неэкономичным. Поэтому большинство научных исследований в области химической технологии направлено на комплексное изучение возможностей снижения энергопотребления в процессе ректификации, и они являются актуальными.

Как известно, при анализе и синтезе процесса многокомпонентной ректификации выявляются наиболее оптимальные пути и варианты решения проблемы снижения энергозатрат. Поэтому в первую очередь необходимо создать достаточно точную математическую модель процесса, в виде описания ее системой уравнений (материального и теплового балансов, фазового равновесия и кинетики массопередачи), и ее программного обеспечения.

Большой вклад в развитие процесса разделения внесли отечественные и зарубежные ученые: Д. Коновалов, М. Вревский, Ф. Браун, Е. Сорель и более позже – В. Ветохин, А. Бояринов, С. Львовь, Ф. Петлюк, Л. Серафимов, Дж. Праусниц, Ч. Холланд и др.

В настоящее время создано много программ расчета процесса ректификации, в том числе – коммерческие универсальные моделирующие программы (УМП), широко применяемые в мире (Chemcad, AspenPlus, Hysys, Pro/II, DESIGN II и др.). Однако большинство (более ранних) программ написаны на устаревших языках программирования и не могут работать на современных операционных системах, а более поздние – дорогостоящие и трудны в использовании, а иногда не удовлетворяют требованиям практики.

Поэтому актуальной является задача создания удобной для пользователя универсальной моделирующей программы расчета многокомпонентной ректификации с использованием современных методов математического моделирования, языка программирования и обобщенного алгоритма.

Цель работы – комплексный подход при создании математического описания процесса ректификации многокомпонентных систем (МКС) и современного программного обеспечения для использования их при анализе и синтезе отдельных ректификационных колонн и их взаимосвязанных систем.

Для достижения поставленной цели были решены следующие задачи:

- совершенствования алгоритмов и программного обеспечения для расчета парожидкостного равновесия с использованием различных термодинамических моделей;
- разработки алгоритма и программного обеспечения для расчета коэффициентов бинарного взаимодействия различных моделей парожидкостного равновесия при наличии и отсутствии экспериментальных данных бинарных пар;
- совершенствования методов, алгоритмов расчета систем уравнений и их программного обеспечения для процесса многокомпонентной ректификации;
- создания базы данных, необходимой для расчета многокомпонентной ректификации;
- создания программного комплекса DISTSIM на языке Visual Basic.Net 2008.

Научная новизна.

1. Составлено обобщенное математическое описание и методы решения системы уравнений материальных и тепловых балансов, фазового равновесия и кинетики массопередачи многокомпонентной ректификации для использования параметров модели при расчете сложных одноколонных и взаимосвязанной системы колонн.

2. Систематизированы и развиты математические методы и алгоритмы решения систем уравнений многокомпонентной ректификации (трехдиагональной матрицы, 2N-Ньютона, Ньютона-Рафсона, гомотопии, и двухконтурный метод) и составлено их программное обеспечение с использованием известных термодинамических моделей Соава-Редлиха-Квонга (СРК), Пенга-Ропинсона (ПР), Вильсона, НРТЛ, ЮНИКВАК, ЮНИФАК, АСОГ и др.

3. Развиты методы (Гаусса-Ньютона и Левенберга-Марквардта) и алгоритмы расчета для поиска параметров бинарного взаимодействия моделей Вильсона, НРТЛ, ЮНИКВАК.

4. Разработан *пакет прикладных программ* расчета параметров моделей парожидкостного равновесия Вильсона, НРТЛ, ЮНИКВАК, ЮНИФАК, АСОГ, СРК, ПР, Чао-Сидера, Грайсона-Стрида на языке Visual Basic.Net 2008.

5. Созданы *база данных* (электронный справочник) **THERMOBANK** (3,89 Мб) и *программное обеспечение* управления базой данных, содержащая физико-химические свойства 618 веществ и параметры моделей парожидкостного равновесия: Вильсона, НРТЛ, ЮНИКВАК, ЮНИФАК, АСОГ, СРК, ПР, Чао-Сидера, Грайсона-Стрида и др. База данных может пополняться.

6. Разработан алгоритм и *программное обеспечение* – **DISTSIM** (8,31 Мб), состоящие из **модулей**: ввода-вывода; расчета параметров термодинамических моделей парожидкостного равновесия; управления базой данных THERMOBANKом и расчета ректификационных колонн и их систем.

Практическая ценность работы.

Комплекс программ расчета процесса ректификации многокомпонентных систем, позволит использовать их при реконструкции старых и проектировании новых ректификационных колонн, а также при анализе и синтезе систем разделения в химических, нефтехимических и нефтеперерабатывающих отраслях промышленности. Программное обеспечение DISTSIM и база данных THERMOBANK защищены в Роспатенте.

Использование комплекса DISTSIM на стадии анализа и синтеза отдельных колонн и их взаимосвязанных систем позволит определить степень энерго- и ресурсосбережения за счет рекуперации тепла и оптимизации процесса разделения в отдельных колоннах. База данных (электронный справочник) THERMOBANK значительно снизит рутинный труд пользователей при подготовке исходных данных для расчета.

Апробация работы. Основные результаты диссертационной работы доложены и обсуждены на 3-й Международной конференции «Фундаментальные проблемы системной безопасности и устойчивости», Москва, 2011 г.

Публикации. По теме диссертационной работы опубликовано 8 работ, из них 6 рекомендованы ВАК РФ.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, условных обозначений, 4 глав, заключения, приложения и списка использованной литературы, включающего 126 наименований работ отечественных и зарубежных авторов. Общий объем работы составляет 223 страниц печатного текста, включая 38 рисунка и 37 таблиц.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ.

Во введении отражена и обоснована актуальность работы и сформулирована ее цель.

В первой главе диссертации приведен литературный обзор, в котором рассмотрены основные этапы развития компьютерного моделирования в химической технологии, в том числе для процесса многокомпонентной ректификации. В этой же главе представлены работы отдельных авторов и крупных научных подразделений России,

проанализированы их преимущества и недостатки, связанные с поиском более эффективных и надежных методов решения систем нелинейных уравнений для расчета парожидкостного равновесия многокомпонентных смесей с использованием известных моделей Вильсона, НРТЛ и т.д., а также процесса ректификации. Рассмотрены математические модели расчета коэффициентов фазового равновесия кинетики массопередачи, энтальпии фаз и области их применения. Анализ литературных источников показал отсутствие использования современных программ управления информацией (Microsoft Access, SQL Sever и др.) на разных уровнях моделирования и расчета процесса ректификации.

В результате литературного обзора была сформулирована цель диссертационной работы и задачи ее реализации.

Вторая глава диссертации посвящена математическому описанию процесса ректификации многокомпонентных систем в сложной колонне, структурная схема которой приведена на рис. 1, и методы его решения.

Система уравнений математической модели процесса многокомпонентной ректификации представляется в двух видах, в зависимости от методов и выбранных переменных.

Система $N(2C+3)$ уравнений в соответствии со схемой рис. 1:

– материального баланса

$$M_{i,j} = L_{j-1}x_{i,j-1} + V_{j+1}y_{i,j+1} + F_j^L z_{i,j}^L + F_{j+1}^V z_{i,j+1}^V - (L_j + U_j)x_{i,j} - (V_j + W_j)y_{i,j} = 0, \quad (1)$$

– фазового равновесия

$$E_{i,j} = \eta_j K_{i,j} x_{i,j} - y_{i,j} + (1 - \eta_j) y_{i,j+1} = 0. \quad (2)$$

– стехиометрических соотношений

$$(S_x)_j = \sum_{i=1}^C x_{i,j} - 1 = 0. \quad (3) \quad (S_y)_j = \sum_{i=1}^C y_{i,j} - 1 = 0. \quad (4)$$

– теплового баланса

$$H_j = L_{j-1}H_{j-1}^L + V_{j+1}H_{j+1}^V + F_j^L H_j^{Fl} + F_{j+1}^V H_{j+1}^{Fv} - (L_j + U_j)H_j^L - (V_j + W_j)H_j^V + Q_j = 0, \quad (5)$$

В этих уравнениях $1 \leq i \leq C$; $1 \leq j \leq N$; $L_0 = 0$; $V_{N+1} = 0$ и $F_{N+1}^V = 0$.

Переменные системы уравнений MESH (1)-(5) – $L_j, V_j, T_j, x_{i,j}, y_{i,j}$.

Система $N(2C+1)$ уравнений

$$M_{i,j} = l_{i,j-1} + v_{i,j+1} + F_j^L z_{i,j}^L + F_{j+1}^V z_{i,j+1}^V - R_j^L l_{i,j} - R_j^V v_{i,j} = 0. \quad (6)$$

$$E_{i,j} = \eta_j K_{i,j} l_{i,j} \frac{\sum_{k=1}^C v_{k,j}}{\sum_{k=1}^C l_{k,j}} - v_{i,j} + (1 - \eta_j) v_{i,j+1} \frac{\sum_{k=1}^C v_{k,j+1}}{\sum_{k=1}^C l_{k,j+1}} = 0. \quad (7)$$

$$H_j = H_{j-1}^L \sum_{i=1}^C l_{i,j-1} + H_{j+1}^V \sum_{i=1}^C v_{i,j-1} + F_j^L H_j^{Fl} + F_{j+1}^V H_{j+1}^{Fv} - R_j^L H_j^L \sum_{i=1}^C l_{i,j} - R_j^V H_j^V \sum_{i=1}^C v_{i,j} + Q_j = 0. \quad (8)$$

где i – число компонента; j – номер тарелки; $z_{i,j}^L, z_{i,j}^V$ – состав жидкой и паровой фаз смеси в питании, поступающего на j -ю тарелку; F_j^L, F_j^V – количество питания в виде жидкости и пара, поступающего на j -ю тарелку; $K_{i,j}$ – константы парожидкостного равновесия i -го компонента на j -й тарелке; η_j – КПД j -й тарелки; H_j^{Fl}, H_j^{Fv} – энтальпии жидкости и пара, поступающих на j -ю тарелку соответственно; C – число компонентов; N – число тарелок; остальные параметры – см. рис.1; $l_{i,j}, v_{i,j}$ – покомпонентные потоки жидкости ($L_j x_{ij}$) и пара ($V_j y_{ij}$) соответственно; R_j^L, R_j^V – величины определяются по формулам: $R_j^L = 1 + U_j/L_j$; $R_j^V = 1 + W_j/V_j$; F_j – поток в питании j -й тарелки; W_j – отбор потока пара с j -й тарелки; U_j – отбор потока жидкости с j -й тарелки; Q_j – количество тепла, отбираемого с j -й тарелки; L_1, L_N – поток флегмы в колонну, отбор кубового остатка соответственно; V_1 – отбор дистиллята в виде пара; U_1 – отбор дистиллята в виде жидкости.

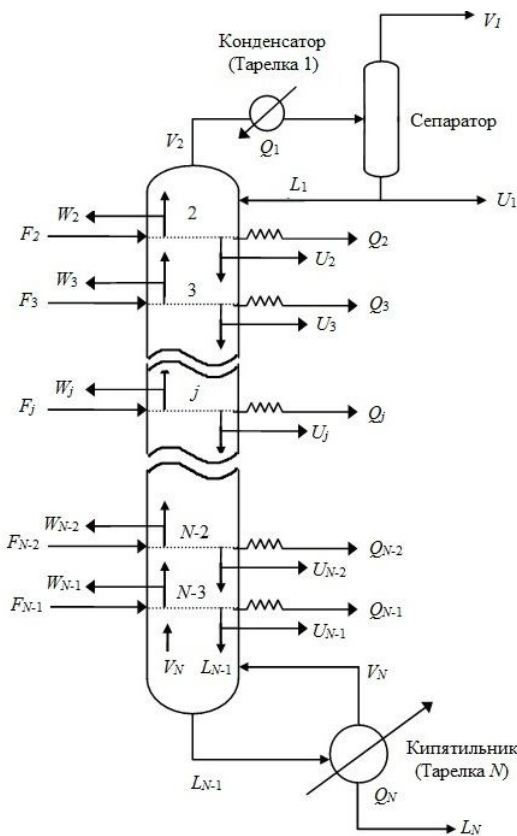


Рис. 1

В уравнениях (6)-(8) $l_{i,0} = 0$; $R_1^V = 1$; $v_{i,N+1} = 0$ и $F_{N+1}^V = 0$. Переменными систем уравнений (6)-(8) MESH (по первым буквам системы) являются $l_{i,j}, v_{i,j}, T_j$.

В обобщенном виде $K_{i,j}, H_j^L$ и H_j^V определяются по формулам:

$$\begin{aligned} K_{i,j} &= K_{i,j}(T_j, P_j, X_j, Y_j) \\ H_j^L &= H_j^L(T_j, P_j, X_j) \\ H_j^V &= H_j^V(T_j, P_j, Y_j), \end{aligned} \quad (9)$$

где $X_j = (x_{1,j}, x_{2,j}, \dots, x_{C,j})$; $Y_j = (y_{1,j}, y_{2,j}, \dots, y_{C,j})$.

Для решения системы уравнений MESH в диссертации представлены их математические

описания, алгоритмы расчета и программное обеспечение по двум группам методов:

– *последовательные*: трехдиагональной матрицы (Bubble Point method), 2N-Ньютона (2N-Newton method), двухконтурный (Inside-Out method);

– *одновременные*: Ньютона-Рафсона или его модификация (Simultaneous correction method), гомотопии (homotopy continuation method).

Преимуществом *последовательных* методов является то, что не требуется большой памяти, а время расчета мало. Однако из-за того, что независимые переменные корректируются последовательно, то коэффициенты равновесия и энтальпии рассчитываются с использованием предыдущих значений составов паровой и жидкой фаз. Это может вызвать колебания, и даже несходимость систем уравнений для сильно неидеальных смесей. Для преодоления этого недостатка применяется метод “Inside-Out”.

Одновременный подход по сравнению с последовательным может обеспечить сходимость для сильно неидеальных систем (главный недостаток последовательного подхода). Однако при этом появляется новая проблема – метод сходится только при довольно хорошем начальном приближении переменных. В этом случае автор предлагает использовать метод гомотопии.

В работе автор приводит возможности использования методов расчета (области их применения и исходные данные для расчета процесса ректификации разными методами).

Для определения минимального флегмового числа многокомпонентных смесей в работе автор рассмотрел метод Андервуда и свой более простой метод, основанный на однонаправленном потарелочном расчете колонны. Сравнительные результаты этих двух методов, показали их инвариантность.

Третья глава диссертации посвящена систематизация методов расчета коэффициентов парожидкостного равновесия, энтальпии фаз, и области их применения, с целью использования их в базе данных THERMOBANK, разработанной автором.

Коэффициенты фазового равновесия определялись по формулам:

– *при низком давлении*:
$$K_i = \gamma_i \frac{P_i^{vp}}{P}, \quad (10)$$

где γ_i – коэффициент активности определяется по одному из уравнений: Маргулеса, Ван-Лаара, Вильсона, НРТЛ, ЮНИКВАК, ЮНИФАК, АСОГ; P_i^{vp} – давление насыщенного пара i -ого компонента.

– при высоком давлении используются уравнения состояния

$$K_i = \left(\frac{\Phi_i^L}{\Phi_i^V} \right), \quad (11)$$

где Φ_i^L , Φ_i^V – коэффициенты фугитивности i -го компонента в жидкой и паровой фазах, рассчитанные по уравнению состояния Соава-Редлиха-Квонга (СРК) или Пенга-Ропинсона (ПР).

– при высоком давлении используются модели Чао-Сидера и Грайсона-Стрида:

$$K_i = \nu_i^0 \frac{\gamma_i}{\Phi_i}, \quad (12)$$

где ν_i^0 – коэффициент летучести (фугитивности) чистого i -го компонента в жидкой фазе; γ_i – коэффициент активности i -го компонента в жидкой фазе, рассчитанный по теории регулярных растворов; Φ_i – коэффициент фугитивности i -го компонента в паровой фазе, рассчитанный по уравнению состояния Редлиха-Квонга.

В работе приведены уравнения, оценка точности и области применения моделей СРК, ПР, Чао-Сидера, Грайсона-Стрида, Маргулеса, Ван-лаара, Вильсона, НРТЛ, ЮНИКВАК, ЮНИФАК и АСОГ, параметры которых вошли в базу данных THERMOBANK.

Зависимости давления насыщенных паров от температуры представлены в виде:

– уравнения Фроста-Колкуорфа-Тодоса (*Frost-Kalkwarf-Thodos*)

$$\ln \left(\frac{P_{vp}}{P_r} \right) = B \left(\frac{1}{T_r} - 1 \right) + C \ln(T_r) + \frac{27}{64} \left(\frac{P_{vp}}{P_r T_r^2} - 1 \right), \quad (13)$$

– уравнения Антуана

$$\ln(P_{vp}) = A - \frac{B}{C + T} \quad (14)$$

– уравнение Вагнера (*Wagner*)

$$\ln \left(\frac{P_{vp}}{P_r} \right) = \frac{a\tau + b\tau^{1.5} + c\tau^3 + d\tau^6}{1 - \tau}, \quad (15)$$

где P_{vp} – давление насыщенного пара; T – температура; $T_r = T/T_c$; $P_r = P/P_c$; T_c , P_c критические температура и давление; A , B , C – константы; $\tau = 1 - T_r$; a , b , c , d – константы.

Константы уравнений (13)-(15) для более чем 600 компонентов приведены в базе данных THERMOBANK.

Энтальпии жидкой и паровой фаз вычисляются по формулам

$$H^V = \sum y_i H_i^0 + \Delta H^V; \quad H^L = \sum x_i H_i^0 + \Delta H^L \quad (16)$$

где H_i^0 – энтальпия идеального газового состояния:

$$H_i^0 = (\Delta H_{298.1}^0)_i + \int_{298.1}^T C_{p_i} dT, \quad (17)$$

где C_{p_i} – теплоемкость i -го компонента, представленная полиномом

$$C_{p_i} = A + BT + CT^2 + DT^3, \quad (18)$$

где $(\Delta H_{298.1}^0)_i$ – стандартная теплота образования i -го компонента (в практике расчетов эта величина обычно игнорируется); A, B, C, D – константы.

В обобщенном виде изотермические коррекции энтальпий ΔH^V и ΔH^L :

$$\Delta H^L = \sum_{i=1}^C x_i \left[-RT^2 \left(\frac{\partial f_i^L}{\partial T} \right)_P \right]; \quad \Delta H^V = \sum_{i=1}^C y_i \left[-RT^2 \left(\frac{\partial f_i^V}{\partial T} \right)_P \right]. \quad (19)$$

где f_i^L, f_i^V – фугитивности i -го компонента в жидкой и паровой фазах, рассчитанные по конкретной модели K_i .

В этой же главе приведены зависимости с использованием аналитических и численных методов определения *избыточной энтальпии* ΔH^L и ΔH^V для моделей Маргулеса, Ван-лаара, Вильсона, НРТЛ, ЮНИКВАК, ЮНИФАК, АСОГ, СРК, ПР, Чао-Сидера, Грайсона-Стрида. Дан расчет *теплоты парообразования* ΔH_V с учетом фактора ацентричности ω и разных давлений паров.

Как известно, при расчете коэффициента активности компонентов неидеальных систем используются модели Вильсона, НРТЛ или ЮНИКВАК, для которых необходимо знать параметры бинарного взаимодействия, информация о которых зачастую отсутствует. В настоящее время имеется много экспериментальных данных парожидкостного равновесия бинарных пар. Используя алгоритм Левенберга-Марквардта, автор составил программное обеспечение по определению параметров бинарного взаимодействия для моделей Вильсона, НРТЛ и ЮНИКВАК [3]. При отсутствии экспериментальных данных (использовать модели Вильсона, НРТЛ или ЮНИКВАК невозможно) в работе рекомендуется использовать модели ЮНИФАК и АСОГ.

Для обеспечения исходной информацией при расчете процесса ректификации в работе создана база данных THERMOBANK (рис. 2), содержащая физико-химические параметры индивидуальных веществ (более 600) и параметры бинарного взаимодействия вышеупомянутых моделей парожидкостного равновесия.

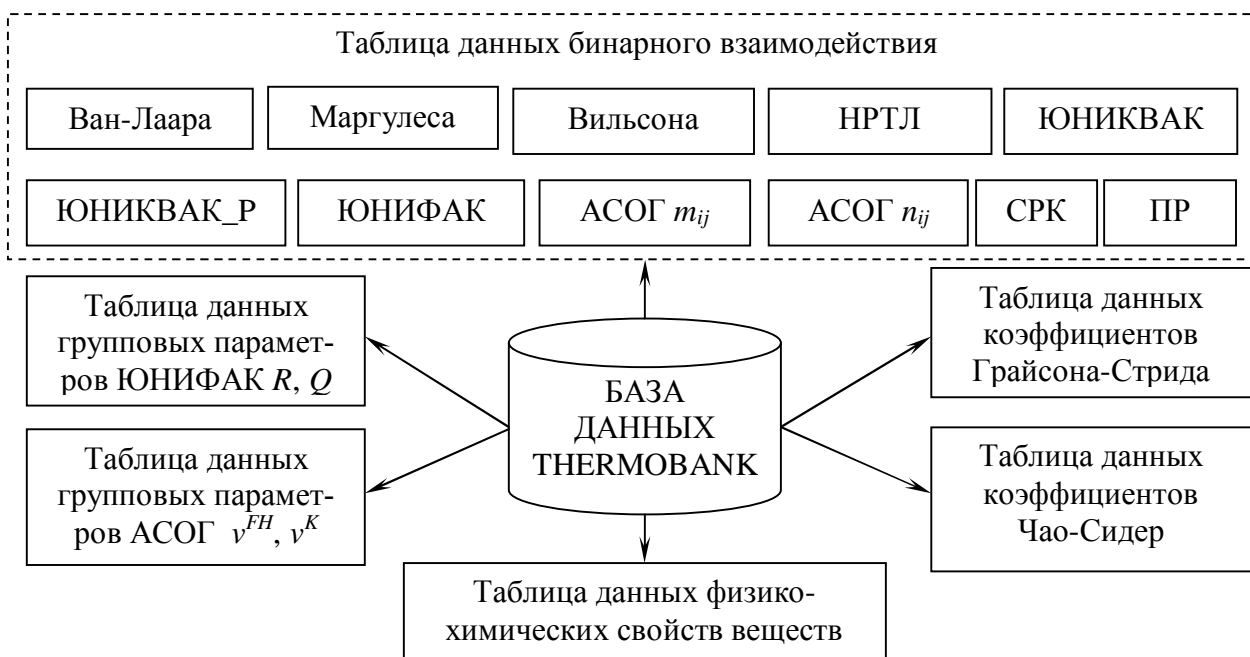


Рис. 2. Блок-схема структуры базы данных THERMOBANK

В четвертой главе приведен алгоритм и программа расчета парожидкостного равновесия и ректификации многокомпонентных смесей DISTSIM (рис. 3) на языке Visual Basic.Net 2008.

Для проверки работы программного комплекса DISTSIM при расчете парожидкостного равновесия, было использовано 5 примеров, из них 4 примера – для бинарных (ацетон – бензол; бензол – фенол) и многокомпонентных смесей (*трехкомпонентная смесь*: ацетон–изопропиловый спирт–вода и *пятикомпонентная смесь*: метан – этан – пропан – пентан – гексан) при различных давлениях и температурах. Результаты расчета (в виде графиков и таблиц) сравнивались с экспериментальными данными. Результаты расчета находились в пределах ошибки эксперимента.

При расчете равновесия бинарных смесей использовались модели Вильсона и НРТЛ. Для *трехкомпонентной смеси* использовались модели ЮНИФАК и АСОГ, так как в базе данных для бинарной пары ацетон – изопропиловый спирт отсутствуют параметры бинарного взаимодействия для расчета по моделям Вильсона, НРТЛ и ЮНИКВАК. Для *пятикомпонентной смеси* использовалось уравнение состояния СРК, так как процесс происходит при высоких давлениях (таблица 1).

В пятом примере был проведен расчет параметров бинарного взаимодействия для моделей Вильсона, НРТЛ и ЮНИКВАК бинарной пары ацетон – изопропиловый спирт при известных экспериментальных данных фазового равновесия при давлении

0,10133 МПа. Использовались два алгоритма Гаусса-Ньютона и Левенберга-Марквардта, причем последний метод показал хорошую сходимость и скорость решения. Для проверки точности полученных коэффициентов они используются для расчета парожидкостного равновесия трехкомпонентной смеси (ацетон – изопропиловый спирт – вода). Все результаты расчета находятся в пределах ошибки эксперим-

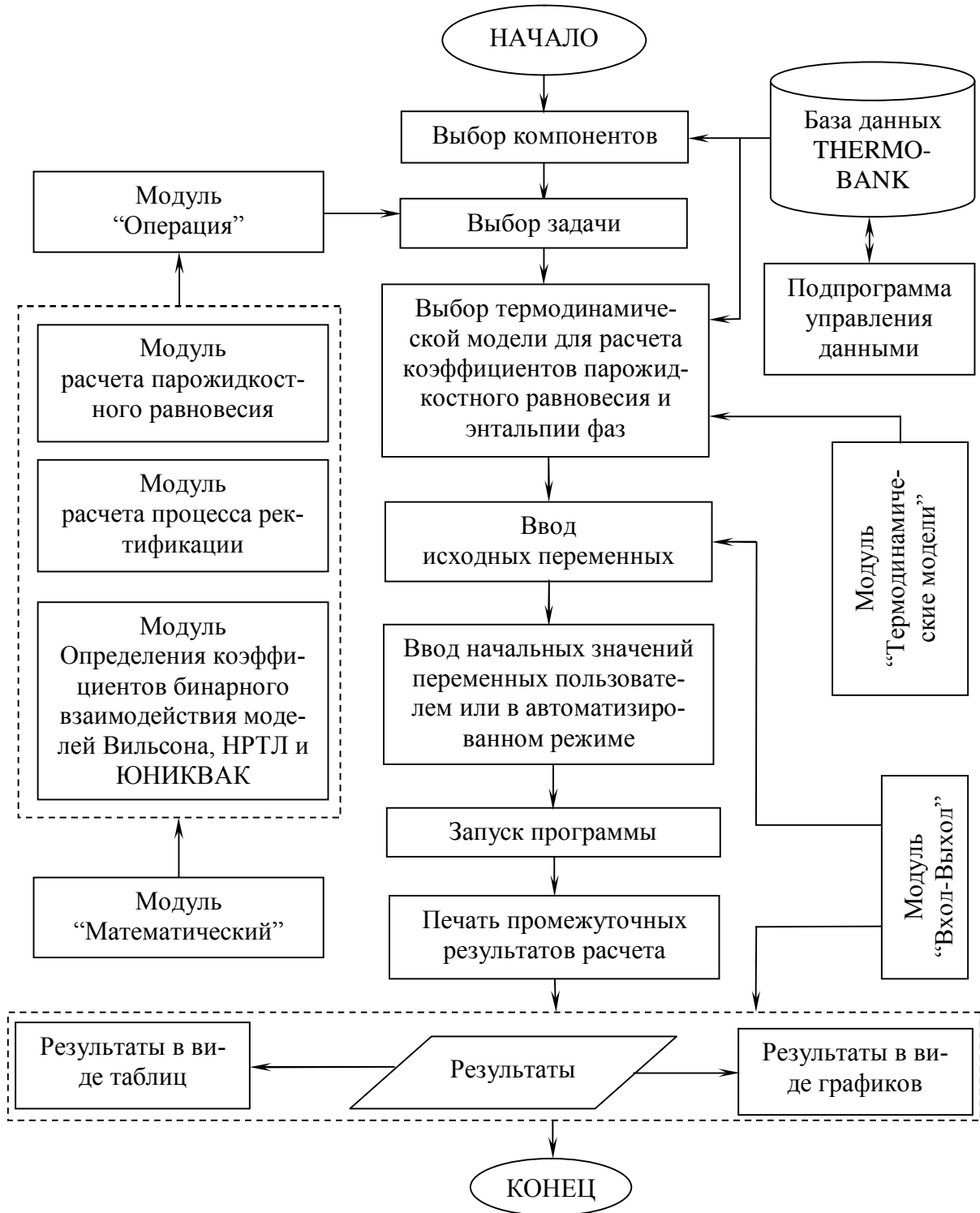


Рис. 3. Блок-схема структуры и принципа работы программы DISTSIM

Табл. 1. Расчетные (уравнения состояния СРК) и экспериментальные значения парожидкостного равновесия пятикомпонентной системы: метан (1)–этан (2)–пропан (3)–пентан (4)–гексан (5) при 310,95 К

№	$x_1^{экс}$	$x_2^{экс}$	$x_3^{экс}$	$x_4^{экс}$	$y_1^{экс}$	$y_2^{экс}$	$y_3^{экс}$	$y_4^{экс}$	$P^{экс}$ МПа
1	0.3042	0.1311	0.2026	0.2021	0.7801	0.1102	0.0787	0.0223	7.2143
2	0.3472	0.1325	0.1893	0.1613	0.804	0.1039	0.07	0.014	8.5113
3	0.3858	0.1314	0.1755	0.1449	0.7645	0.1025	0.0779	0.0309	9.7779
4	0.4512	0.1308	0.149	0.1256	0.7853	0.1022	0.0764	0.0198	11.2977
5	0.5574	0.1222	0.1369	0.0851	0.7647	0.1022	0.0779	0.0309	12.5643

(продолжение табл. 1)

№	$y_1^{расч}$	$y_2^{расч}$	$y_3^{расч}$	$y_4^{расч}$	$P^{расч}$ МПа	$\frac{ \Delta P }{P^{экс}}$ %	$ \Delta y_1 $	$ \Delta y_2 $	$ \Delta y_3 $	$ \Delta y_4 $
1	0.7819	0.1074	0.0846	0.0192	7.615	5.6	0.0018	0.0028	0.0059	0.0031
2	0.7891	0.1039	0.0802	0.0177	8.708	2.3	0.0149	0.0000	0.0102	0.0037
3	0.7926	0.1011	0.0770	0.0185	9.663	1.2	0.0281	0.0014	0.0009	0.0124
4	0.7918	0.1005	0.0718	0.0216	11.289	0.1	0.0065	0.0017	0.0046	0.0018
5	0.7590	0.1015	0.0861	0.0292	13.520	7.6	0.0057	0.0007	0.0082	0.0017
Средняя погрешность						3.3	0.0114	0.0013	0.006	0.0046

экспериментальных данных.

В этой же главе приведены 6 примеров расчета процесса многокомпонентной ректификации, в том числе 4 примера расчета сложной колонны (при высоком давлении) и 2 примера для взаимосвязанных систем колонн (при низком давлении).

На рис. 4, а приведены схемы с исходными данными ректификационной колонны – депропанизатора для разделения пятикомпонентной смеси: этан–пропан–н-бутан–н-пентан–н-гексан (пример 8) и системы разделения (рис. 4, б) трехкомпонентной смеси: бензол–толуол–о-ксилол (пример 10). Схемы остальных ректификационных колонн проиллюстрированы на рис. 5, а (пример 6); рис. 5, б (пример 7); рис. 5, в (пример 9).

Для всех примеров расчет колонн осуществлялся с помощью программы DISTSIM, а уравнения равновесия для примеров 6, 7 и 8 осуществлялись с помощью

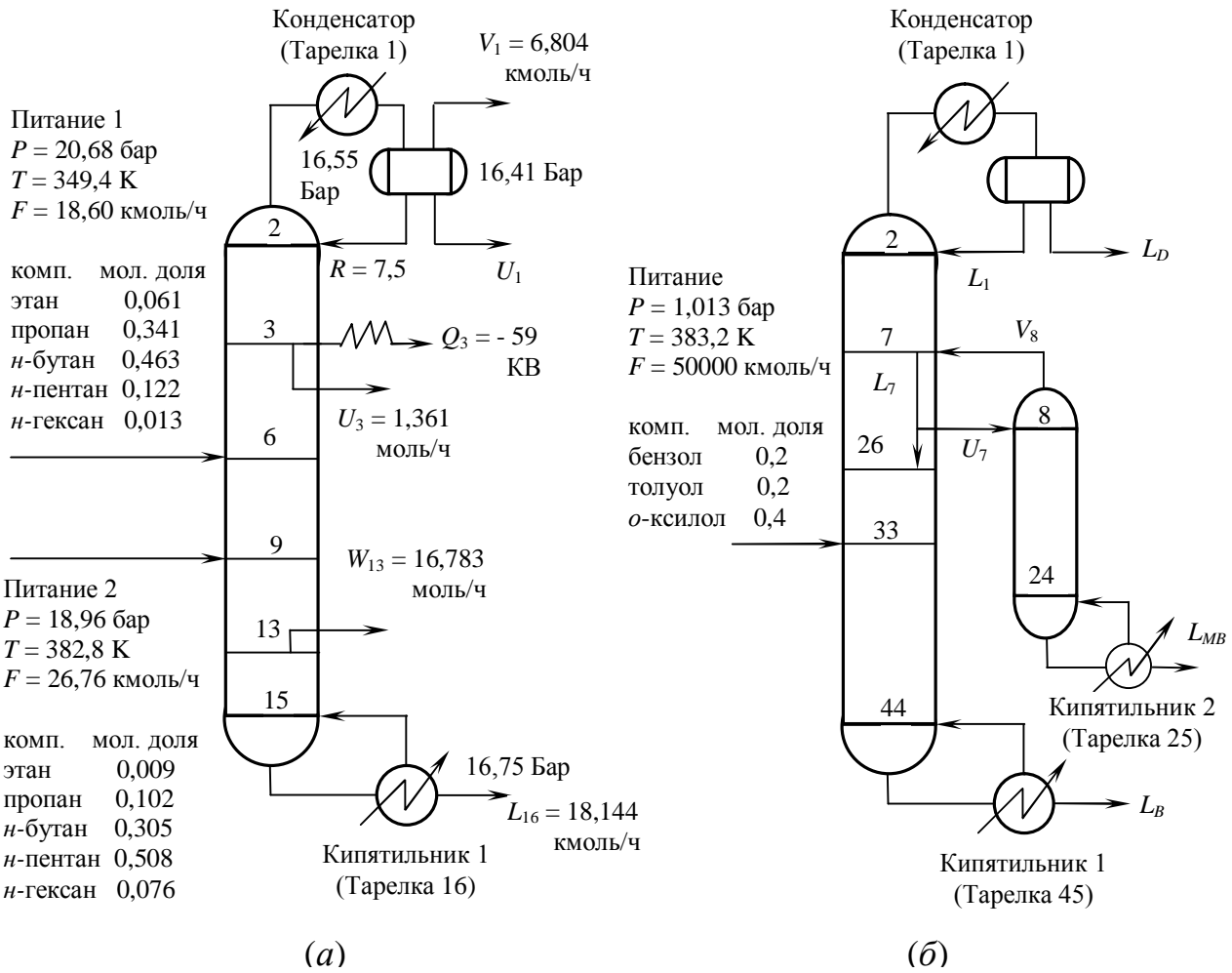


Рис. 4. Схемы системы разделения многокомпонентной смеси с исходными данными: а – депропанизатор; б – ректификационная колонна с отпарной секцией

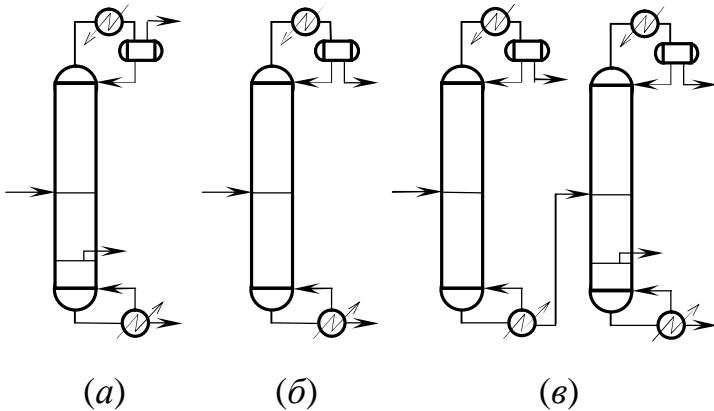


Рис. 5. Схемы колонн по разделению многокомпонентных смесей: а – смеси: этан–пропан–*n*-бутан–пентан–*n*-гексан; б – смеси: 1,3-бутадиен–1-бутен–*n*-пентан–1-пентен–1-гексен–бензол; в – смеси: бензол–толуол–*n*-ксилол

уравнений СРК, ПР и моделей Чао - Сидера, Грайсона - Стрида, так как давление в колоннах высокое. В примерах 9 и 10, для фазового равновесия использовались модели Вильсона, НРТЛ, ЮНИФАК, АСОГ, так как давление в колоннах равно 0,1 МПа. В качестве иллюстрации для примера № 8 в табл. 2 приведены результаты расчета колонны по программе DISTSIM с разными уравнениями фазового равнове-

сия. Результаты сравнивались с коммерческой программой DESIGN II.

Сравнение результатов расчета всех примеров показало, что точность расчета по программе DISTSIM не уступает точности расчета по коммерческой программе DESIGN II.

Табл. 2. Результаты расчета примера № 8

ПРОГРАММЫ	DISTSIM				DESIGN II
	СРК	ПР	Чао-Сидер	Грайсон-Стрид	
(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)
Паровой дистиллят (V_1)					
Температура, К	315,3	315,7	318,2	316,8	315.6
Этан	0,1719	0,1720	0,1730	0,1721	0.1716
Пропан	0,8116	0,8113	0,8141	0,8154	0.8107
н-Бутан	0,0165	0,0166	0,0129	0,0125	0.0177
н-Пентан	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0.0000
н-Гексан	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0.0000
Жидкий дистиллят (U_1)					
Температура, К	315,3	315,7	318,2	316,8	315.6
Этан	0,0744	0,0740	0,0722	0,0734	0.0740
Пропан	0,8805	0,8816	0,8907	0,8890	0.8792
н-Бутан	0,0449	0,0441	0,0370	0,0375	0.0465
н-Пентан	0,0002	0,0002	0,0001	0,0001	0.0002
н-Гексан	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0.0000
Отбор потока жидкости с 3-й тарелки (U_3)					
Температура, К	327,5	327,5	330,0	328,7	327.6
Этан	0,0182	0,0181	0,0168	0,0181	0.0181
Пропан	0,7801	0,7892	0,8006	0,7862	0.7820
н-Бутан	0,1982	0,1893	0,1811	0,1942	0.1964
н-Пентан	0,0035	0,0034	0,0016	0,0015	0.0035
н-Гексан	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0.0000
Отбор парового потока с 13-й тарелки (W_{13})					
Температура, К	392,4	393,2	397,7	395,2	393.15
Этан	0,0001	0,0001	0,0000	0,0001	0.0001
Пропан	0,0291	0,0284	0,0255	0,0260	0.0283
н-Бутан	0,6901	0,6895	0,7020	0,7055	0.6892
н-Пентан	0,2694	0,2702	0,2606	0,2572	0.2704

(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)
н-Гексан	0,0113	0,0119	0,0119	0,0112	0.0120
Кубовый остаток (L_{16})					
Температура, К	412,4	413,0	417,5	415,2	413.01
Этан	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0.0000
Пропан	0,0013	0,0012	0,0009	0,0012	0.0012
н-Бутан	0,2595	0,2607	0,2520	0,2479	0.2603
н-Пентан	0,6248	0,6242	0,6331	0,6363	0.6246
н-Гексан	0,1144	0,1139	0,1139	0,1146	0.1139
Теплота					
$Q_{\text{конд.}}$, КВ	-266,04	-264,14	-278,60	-284,86	-262.43
$Q_{\text{кип.}}$, КВ	462,05	460,43	487,13	491,72	457.45

В 11-ом примере рассмотрен проектный расчет ректификационной колонны для разделения многокомпонентной смеси: этилбензол – *n*-ксилол – *m*-ксилол – *o*-ксилол с составом в мольных долях 0,145 – 0,182 – 0,483 – 0,19 соответственно; сумма примесей легких компонентов в кубе, % (моль) – 0,3; примесь ортоксилола в дистилляте, % – 1,2. Флегмовое число – 9,056, давление в колонне – 1,013 бар. Исходная смесь – в состоянии насыщенной жидкости.

Табл. 3. Результаты расчета примера 11

ПРОГРАММА	DISTSIM	DESIGN II
Дистиллят (тарелка 1)		
Температура, К	411,66	411.1
Этил бензол	0,1770	0.1776
<i>n</i> -Ксилол	0,2221	0.2228
<i>m</i> -Ксилол	0,5890	0.5908
<i>o</i> -Ксилол	0,0119	0.0089
Кубовый остаток (тарелка 112)		
Температура, К	417,60	417.73
Этил бензол	0,0000	0.0000
<i>n</i> -Ксилол	0,0002	0.0004
<i>m</i> -Ксилол	0,0025	0.0026
<i>o</i> -Ксилол	0,9973	0.9970

Результат расчета по программе DISTSIM: минимальное флегмовое число – 6,9. При флегмовом числе 9,056 число тарелок в ректификационной колонне – 112, тарелка питания – 42 (сверху вниз).

В табл. 3. приведены сравнительные данные результатов расчета по разработанной автором программе (проектный расчет) и коммерческой программе DESIGN II (поверочный расчет), из которой следует их инвариантность.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ПО РАБОТЕ

1) Создано математическое описание сложной тарельчатой ректификационной колонны для разделения многокомпонентных смесей для двух типов математических моделей [$N(2C+3)$ и $N(2C+1)$], представленных в виде систем уравнений материальных и тепловых балансов, фазового равновесия и кинетики массопередачи.

2) Предложены и развиты методы и алгоритмы (трехдиагональной матрицы, 2N-Ньютона, Ньютона-Рафсона, гомотопии и двухконтурный метод) решения систем уравнений многокомпонентной ректификации и их программное обеспечение.

3) Создана база данных THERMOBANK (электронный справочник) и программное обеспечение управления базой данных.

4) Создан программный комплекс DISTSIM расчета процесса многокомпонентной ректификации простых и сложных колонн, а также взаимосвязанных систем разделения. В состав DISTSIM входит база данных THERMOBANK.

5) Создана программа поиска параметров бинарного взаимодействия для моделей Вильсона, НРТЛ, ЮНИКВАК с использованием методов Гаусса-Ньютона и Левенберга-Маркварта. При отсутствии данных фазового равновесия бинарных пар используются модели ЮНИФАК и АСОГ.

6) Результаты расчета 11 примеров с использованием комплекса программ DISTSIM показали их надежность при определении парожидкостного равновесия, поиске параметров бинарного взаимодействия, а также расчете отдельных ректификационных колонн и взаимосвязанных систем разделения. Результаты расчета не уступают результатам расчета по коммерческой программе УМП DESIGN II.

7) Программное обеспечение DISTSIM с базой данных THERMOBANK защищены в РОСПАТЕНТе, а результаты работы опубликованы в 4 журналах ВАК.

Основное содержание диссертации изложено в следующих изданиях:

1) Комиссаров Ю.А., Дам Куанг Шанг. Математическое моделирование при расчете парожидкостного равновесия многокомпонентных систем. // Вестник АГТУ. Сер.: Управление, вычислительная техника и информатика. – 2011. № 1. – С. 43-50.

2) Комиссаров Ю.А., Дам Куанг Шанг. Математическая модель и алгоритм расчета процесса ректификации многокомпонентных систем. // Вестник Казанского технологического университета. – 2011. – Т. 14, № 9. – С. 118-126.

3) Комиссаров Ю.А., Дам Куанг Шанг. Использование алгоритма Левенберга-Марквардта для нахождения параметров бинарных пар в уравнениях Вильсона, НРТЛ и ЮНИКВАК. // Вестник АГТУ. Сер.: Управление, вычислительная техника и информатика. – 2011. № 2. – С. 37-42.

4) Комиссаров Ю.А., Дам Куанг Шанг. Предсказание фазового равновесия многокомпонентных систем пар-жидкость и жидкость-жидкость с помощью моделей ЮНИФАК и АСОГ. // Вестник Тамбовского государственного технического университета. – 2012. – Т. 18, № 1. – С. 19-26.

5) Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2012610669 «Программа расчета равновесия пар-жидкость, жидкость-жидкость и процесса ректификации «DISTSIM» / Комиссаров Ю.А., Дам Куанг Шанг. // Заявка № 2011618649. Дата регистрация 12.01.2012.

6) Свидетельство о государственной регистрации базы данных № 2012620061 «База данных термодинамических свойств веществ и параметров бинарного взаимодействия моделей Ванн-лаара, Маргулеса, Вильсона, НРТЛ, ЮНИКВАК, ЮНИФАК, АСОГ и уравнений состояния Соава-Редлиха-Квонга, Пенга-Ропинсона «THERMOBANK» / Комиссаров Ю.А., Дам Куанг Шанг. // Заявка № 2011620857. Дата регистрация 12.01.2012.

7) Комиссаров Ю.А., Дам Куанг Шанг. База данных по физико-химическим свойствам газов и жидкостей. // Вестник Академии. Информатика, Экология, Экономика. – Т. 13, Ч. 1. – М.: – 2011. – С. 64-68.

8) Комиссаров Ю.А., Дам Куанг Шанг. Численный метод решения системы нелинейных уравнений многокомпонентной ректификации. // Фундаментальные проблемы системной безопасности: Сб. статей. Вып. 3 / Вычислительный центр им. А.А. Дородницына РАН. – М.: Вузовская книга. – 2011. – С. 263-269.

PS. Полужирным шрифтом обозначены публикации рекомендованные ВАК РФ.