



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 54 за 1974 г.



Азизов С. А., Али-заде Н. С.,
Искандер-заде З. А.,
Молчанов А.М.

Современное состояние
математического
моделирования
ректификационных колонн

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Современное состояние математического моделирования ректификационных колонн / С.А.Азизов [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 1974. № 54. 18 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=1974-54>

ОРДЕНА ЛЕНИНА ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
АКАДЕМИИ НАУК СССР

**Азизов С. А., Али-заде Н. С., Искандер-заде З. А.,
Молчанов А. М.**

**СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОГО
МОДЕЛИРОВАНИЯ РЕКТИФИКАЦИОННЫХ КОЛОНН**

Препринт № 54

Москва 1974 г.

Современное состояние математического моделирования ректификационных колонн : препр. № 54 / Азизов С. А., Али-заде Н. С., Искендер-заде З. А., Молчанов А. М. ; ИПМ АН СССР. – М. : [б. и.], 1974. – 18 с. – Библиогр.: с. 15–18 (34 назв.).

Реферат

Работа посвящена обсуждению состояния проводимых работ по математическому моделированию динамики ректификационных колонн. Приведена полная модель тарелки колонны и показано, что все применяемые в настоящее время модели получаются из полной модели, при разных упрощающих предположениях. Рассматривается справедливость таких допущений. Даются уравнения для описания потоков, входящих в модель.

Одним из важнейших узлов любого химико-технологического процесса является узел ректификации.

По предварительным данным на процесс ректификации приходится примерно 60-70% энергозатрат любого нефтехимического процесса, а стоимость оборудования составляет 40–50% стоимости всего оборудования.

Именно экономическими соображениями объясняется большой интерес исследователей к этому процессу. Существует большое количество работ по расчету ректификационных колонн, в которых даются методы расчета статики, термодинамики, гидродинамики и массопередачи процесса ректификации. Подробную библиографию по этим исследованиям можно найти в работах С. А. Багатурова, В. В. Кафарова, А. И. Плановского, Н. М. Жаворонкова, О. С. Чехова, Ю. И. Дитнерского и других советских и иностранных авторов.

Однако этих исследований явно недостаточно, чтобы удовлетворить требованиям современной химической технологии. В работе [3] академик Н. М. Жаворонков показывает, что необходимо сосредоточить усилия на фундаментальных исследованиях гидродинамики, тепло- и массообмена при высоких давлениях, температурах и в вакууме, а также исследованиях в области интенсификации процессов с целью создания высокоинтенсивных массообменных аппаратов. В той же работе указывается необходимость расширения работ в области оптимизации и управления химическими процессами и ставит перед кибернетикой проблему помочь в разработке таких интенсивных химических процессов, которые неосуществимы при обычных условиях управления, т.е. создание процессов, работающих в режимах, близких к критическим. В таких процессах, ректификационные колонны, являясь одним из основных элементов,

находятся в особенно трудных условиях. Известно, что ректификационные колонны характеризуются большим числом критических режимов [1], возникновению которых предшествуют различные причины.

Все сказанное делает своевременным более глубокое исследование ректификационных колонн.

Но такие исследования сопряжены с большими трудностями. Экспериментальное исследование ректификационных колонн требует немалых затрат, и зачастую на него трудно решиться из-за опасности аварий и недоступности производства необходимых замеров.

Поэтому, как нам кажется, наиболее удобным для исследования динамики ректификационных колонн может оказаться метод математического моделирования, с последующим использованием ЭВМ для изучения этой модели.

Работы по математическому моделированию ректификационных колонн проводились многими авторами. Обычно они использовали упрощенные модели для исследования сравнительно небольших колонн и основной целью работ был анализ переходных характеристик [4, 5, 6, 7].

Для исследования динамики ректификационных колонн в достаточно широком диапазоне ее работы и выяснения влияния гидро и термодинамики на процесс массообмена необходимо построение более полной математической модели, учитывая переменные не только жидкой, но и паровой фазы.

Так как ректификационные колонны являются трехмерными образованиями, в которых одновременно протекают процессы термодинамические, химические и гидродинамические, то полная модель, в принципе, является системой дифференциальных уравнений в частных производных (три пространственные координаты и одна временная).

Однако такой подход, который, в принципе, является единственно правильным, слишком громоздок. Поэтому всегда будет ощущаться стремление избавиться от ненужной детальности в математическом описании ее работы. Такие упрощения в математической физике наблюдаются уже давно. Классический пример, так называемое, «гидравлическое приближение», когда сложное трехмерное явление заменяется более простой моделью (квази-стационарной).

Таким образом, мы хотим избежать трехмерности на одной тарелке и оставляем зависимость параметра от номера тарелки. Это, конечно, полумера, но есть основание надеяться, что такой подход дает разумные результаты.

Этот общий подход, когда мы модель с обыкновенными дифференциальными уравнениями рассматриваем как предельный случай полной модели в частных производных, позволяет сразу указать границы применимости этой модели, при которых она достаточно хорошо работает.

Исходя из всего вышесказанного, предлагается для более полного изучения режимов работы ректификационных колонн составить модель, которая является частным (осредненным) случаем общих уравнений математической физики.

Предлагаемая модель основана на допущении, что состояние отдельной тарелки достаточно полно описывается семью переменными:

l'_n – количество жидкости в сливном стакане;

l_n – количество жидкости в тарелке;

x_n – концентрация жидкости в тарелке;

θ_n – температура жидкости в тарелке;

v_n – количество пара в тарелке;

y_n – концентрация пара в тарелке;

T_n – температура пара в тарелке;

Исходя из этих допущений, предлагается следующая модель [33]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dl'_n}{d\tau} = L_{n+1} - Z_n \quad (1) \\ \frac{dl_n}{d\tau} = Z_n - L_n - M_n^1 + M_n^2 \quad (2) \\ \frac{d(x_n l_n)}{d\tau} = x_{n+1} Z_n - x_n L_n - M_n^1 \quad (3) \\ c_L \frac{d(\theta_n l_n)}{d\tau} = c_L \theta_{n+1} Z_n - c_L \theta_n L_n + \varphi(T_{n-1} - \theta_n) V_{n-1} - \sum_{i=1}^k q_i \quad (4) \\ \frac{dv_n}{d\tau} = V_{n-1} - V_n + M_n^1 - M_n^2 \quad (5) \\ \frac{d(y_n v_n)}{d\tau} = y_{n-1} V_{n-1} - y_n V_n + M_n^1 \quad (6) \\ c_V \frac{d(T_n v_n)}{d\tau} = c_V T_{n-1} V_{n-1} - c_V T_n V_n + \varphi(T_{n-1} - \theta_n) V_{n-1} + \sum_{i=1}^k q_i \quad (7) \end{array} \right. \quad \text{«А»}$$

Мы вводим упрощенные предположения о характере физических и химических явлений, происходящих на тарелке. Существуют конкретные предположения о зависимости различных потоков от основных переменных процесса.

Есть основания думать, что достаточно широкий и практический интересный диапазон режимов работы ректификационных колонн может быть описан сравнительно несложными механизмами в следующем виде (подробный вывод модели и описание механизмов дано в работе [33]):

1. Весовая скорость жидкости, стекающей в сливное устройство

$$L_n = k(l_n - l^0)^{3/2}. \quad (8)$$

2. Весовая скорость жидкости, поступающей на тарелку

$$Z_n = k_1[(l'_n - l_n) + \xi(P_{n+1} - P_n)]^{1/2}. \quad (9)$$

3. Весовая скорость пара, проходящего через тарелку

$$V_n = a \left[\left(\frac{P_n}{T_n} \right) \{ l(P_n - P_{n+1}) - cl_n \} \right]^{1/2}. \quad (10)$$

4. Скорость массообмена (весовая)

$$M'_r = K_m(y_n^* - y_n), \quad (11)$$

где равновесная концентрация определяется следующим образом:

$$y_n^* = \frac{\alpha x_n}{1 + (\alpha - 1)x_n}. \quad (12)$$

5. Механизмы q_i являются функцией тепловых эффектов конденсации и испарения и определяются через теплоту парообразования:

$$q_i = q(x_n, y_n) \quad (13)$$

Нам не известно ни одной работы, где использовалась бы модель типа «А». Во всех известных работах использовались модели с различными упрощающими допущениями. Предлагаемая модель, позволяет, как нам кажется, провести более полную классификацию существующих моделей.

а) Характерным допущением во всех работах [4, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20] является пренебрежение изменением задержки пара на тарелке.

Если в модели «А» пренебречь изменением переменных, характеризующих паровую фазу и сложить почленно уравнения (2) и (5); (3) и (6); (4) и (7) и в (1) уравнении предположим, что равновесие устанавливается очень быстро, получим:

$$\frac{dl_n}{d\tau} = L_{n+1} - L_n + V_{n-1} - V_n, \quad (14)$$

$$\frac{d(x_n l_n)}{d\tau} = x_{n+1} L_{n+1} - x_n L_n + y_{n-1} V_{n-1} - y_n V_n, \quad (15)$$

$$c_L \frac{d(\theta_n l_n)}{d\tau} = c_L \theta_{n+1} L_{n+1} - c_L \theta_n L_n + c_V T_{n-1} V_{n-1} - c_V T_n V_n + q_1 - q_2. \quad (16)$$

В принципе, такой подход возможен, так как при совместном рассмотрении обеих фаз в системе появляется малый параметр из-за разности плотностей жидкость и пара, в результате этого система расщепляется на быстрые и медленные переменные. Считая что в системе «А» часть переменных (быстрые) по сравнению с остальными (медленными) очень быстро выходят на стационарное положение, приписывая им постоянные значения (квазистационарное положение) получаем упрощенную систему относительно медленных переменных (система «Б»). Однако, полученные таким образом решения упрощенной системы не всегда являются хорошим приближением решения полной системы уравнений. Теорема Тихонова [34] определяет условия возможности проведения указанной процедуры. Однако, всегда существуют такие случаи, когда условия теоремы Тихонова не выполнены и поэтому процедура квазистационарности не выявляет истинной картины и приходится решать исходную систему уравнений. Нами проведены исследования о возможности применения теоремы Тихонова к модели ректификационной колонны. Результаты исследований готовятся к публикации.

Но даже после такого упрочения модель «Б» была исследована очень мало. Известно всего несколько работ [14, 16, 18] где использована модель «Б» с дополнительным предположением, что энергия испарения и конденсации равны и поэтому эти члены отброшены.

β) Значительно большее количество работ посвящено исследованию системы типа «Б» без уравнения (16), то есть принимается, что энтальпии жидкости и пара постоянны по высоте колонны [4, 9, 12, 13, 19]. Заметим, что такое допущение справедливо только для тех смесей, теплосодержание которых слабо зависит от состава.

γ) В других работах [8, 10, 11, 15, 17, 20] пренебрегают изменением количества жидкости на тарелке, предполагая, что гидродинамическое равновесие на тарелке достигается быстрее, чем кинетическое и рассматривают только уравнение (15). Именно такой подход наблюдается в большинстве работ.

δ) Известна также работа [21], где использовано только уравнение (16) системы «Б», т.е. исследуется только термодинамика колонны при $q_1 = q_2$ и по ней делаются выводы о кинетике процесса, т.к. известно, что температура на тарелке строго зависит от концентрации и по виду профиля температур в колонне можно судить о концентрации.

Однако, этими (несомненно, главными) обстоятельствами упрощения не исчерпываются. Различные авторы вводят различные упрощения при выборе механизмов, входящих в модель потоков, по возможности линеаризируя их.

Остановимся на некоторых из них.

а) Механизм L_n определяется по-разному. В работе [14] этот механизм описан следующим образом:

$$l_n = l_n^0 + kL_n^{2/3}. \quad (17)$$

В работе [22] используется линейная запись уравнения (17):

$$l_n = l_n^0 + kL_n. \quad (18)$$

В другой работе [16] уравнение (18) дополняется членом, учитывающим влияние паровой фазы:

$$l_n = l_n^0 + k'L_n - k''V_{n-1}. \quad (19)$$

Наиболее интересным, на наш взгляд, является нелинейное уравнение (17), которое и взято за основу в модели «А».

б) Механизм V_n в работе [16] определяется из общего сопротивления тарелки в следующем виде:

$$V_n = a \left(\frac{P_n}{T_n} \right)^{1/2} [a_1(P_n - P_{n+1}) - cl_{n+1}]^{1/2}. \quad (20)$$

В работе [14] использовалось уравнение вида:

$$V_n = [k_2(P_n - P_{n+1})]^{1/2} \quad (21)$$

Отличие механизма (20) и (21) состоит в том, что уравнение (20) учитывает гидродинамическое сопротивление тарелки. В большинстве же работ величину V_n берут постоянной по колонне.

в) Еще более разнообразен подход при определении равновесного состава пара на тарелке. Во многих работах состав пара, покидающего тарелку, принимают равновесным [7, 11, 22, 23, 24], предполагая, что на тарелке достигается полное равновесие и состав пара, покидающего тарелку, равен равновесному и используют различные формулы для его нахождения.

В работе [25] для определения равновесной концентрации используется формула

$$y_n^* = x_n + (\alpha - 1)x_n(1 - x_n). \quad (22)$$

В работах [26,27] используется следующее выражение:

$$y_n = \frac{\alpha x_n}{1 + (\alpha - 1)x_n}. \quad (23)$$

Но так как эти формулы нелинейны, часто пользуются их линейной формулой [22, 23, 24, 28]

$$y_n = \alpha x_n. \quad (24)$$

Или, как в работах [29, 31]:

$$y_n = b_0 x_n + b_{01}. \quad (25)$$

Даже в случае законности этих упрощений, на сегодняшний день, остается открытым вопрос о поведении быстрых переменных (характер выхода на стационар). Как отмечалось выше, неизвестно ни одной работы, где рассматривалась бы полная модель ректификационной колонны.

Во всех известных работах модель рассматривалась со значительными упрощениями. Этот факт диктовался многими объективными причинами. При исследовании наиболее полной модели с более точными механизмами приходится иметь дело с системой нелинейных дифференциальных уравнений, включающих малый параметр. Обычно исследование даже нескольких нелинейных уравнение, включающих малый параметр, сопряжено со значительными трудностями, а в случае исследования ректификационных колонн приводится рассматривать систему дифференциальных уравнений большого порядка (порядок системы растет пропорционально количеству тарелок исследуемой ректификационной колонны).

Но положение значительно улучшается с применением ЭВМ. Современные ЭВМ дают возможность исследовать ректификационные колонны с использованием полной модели с наиболее полными механизмами, хотя это сопряжено со значительными, но преодолимыми трудностями вычислительного характера.

В настоящее время в связи с бурным развитием нефтехимических процессов возникла необходимость исследования более полных моделей. Это дает возможность выяснить многие вопросы, связанные с определением границ устойчивости, характера потери устойчивости по разным параметрам, нахождения наиболее выгодных режимов работы колонны, что практически невозможно проделать ни экспериментально, ни на упрощенных моделях. А это в свою очередь создает условия для создания еще более производительных ректификационных колонн и значительно поможет управлению процессом ректификации.

Обозначения:

а) переменные параметры

h_n – уровень жидкости на тарелке

l_n – количество жидкости на тарелке

v_n – количество пара на тарелке

x_n, y_n – соответственно концентрации легких компонент в жидкости и паре на тарелке

θ_n, T_n – соответственно температуры жидкости и пара на тарелке.

б) постоянные коэффициенты

c_L, c_V – соответственно теплоемкости жидкости и пара

l_n – количество жидкости, приходящееся на объем от поверхности тарелки до верха сливной перегородки

$k_1, k_2, k_3, a, a_1, b, c$ – размерные коэффициенты пропорциональности

в) переменные коэффициенты

α – относительная летучесть

b_0, b_{01} – коэффициенты

г) индексы

n – номер тарелки

Литература

1. В. В. Кафаров "Основы массопередачи". "Высшая школа", 1962.
2. А. А. Плановский и др. "Процессы и аппараты химической и нефтехимической технологии". «Стандартгиз», 1961.
3. Н. М. Жаворонков. "Теоретические основы химической технологии", т.V, N 3, 1971, т.VI, N 5, 1972.
4. Rosenbrock H. H. "Trans.Inst.Chem.Engng.(London) 35, 347-351, 1957.
5. Rosenbrock H. H. B.Sc(Eng) Ph.D. M.I.E.E. "Trans.Inst.Chem.Engng. 38, 1960
6. Rosenbrock H. H. Brit.chem.Engng. 3,1958.
7. Rosenbrock H. H. I.F.A.C. Congress Moscow 4, 303-308, 1960.
8. И. В. Анисимов. "Труды II-го Международного конгресса ИФАК", т.IV, стр.265, «Наука», 1965.
9. Armstrong W. D., Wood R. M. "Trans.Inst.Chem.Engng.(London) 39, 65, 1961.
10. Ceadlske N. H. A.I.Ch.E.I. 7, 653, 1961.
11. Д. П. Кэмпбэлл. "Динамика процессов химической технологии". изд-во ГХП, 1962.

12. Harriot P. "Process Control" chap 14 McGraw-Hill New-York, 1964
13. Lamb D. E., Pigford R. L., Rippin D. W. T. "Chem. Engng. Progr." (Symp.Ser.) 57, N 36, 132, 1961.
14. Ж. Заворка. "Труды II-го Международного конгресса ИФАК", т.IV, стр.250, "Наука", 1965.
15. Mah R. S. G., Michaelson S., Sargent R. W. H. "Chem.Engng.Sci." 17,619,1962.
16. Pieser A. M., Grower S. S., "Chem. Engng. Progr." 58(9), 65, 1962.
17. Pigford R. L. "Dechema monograph", 53(25), 217, 1964.
18. Rodemark O., Rijnsdorp I. E., Proceedings of Fifth world Petroleum Congress, section VII p.59, New-York (1959).
19. Rosenbrock H. H. "Trans.Inst.Chem.Engng.(London) 40, 35 (1962).
20. Wilde D. L. "Chem.Engng.Sci. 17, 447(1962).
21. И. В. Анисимов. "Автоматическое регулирование ректификационных колонн", Химия, 1961.
22. К. Изава, Т. Моринга. "Труды II-го Международного конгресса ИФАК", т.IV, стр.293, "Наука", 1965.
23. Burmam L. K., Maddox R. N. "Progress design and development", 8, 4, 433(1969).
24. Д. Чарльз, Холланд. "Многокомпонентная ректификация". Химия, М., 1969.
25. Pigford R. L., Tere I. B., Garrahan C. I. "Ind. Engng. Chem." 43, 2592 (1951).
26. Robert F., Jackson and Robert L. Pigford. "Engng.design.and proc.development" 48, N 6, (1956).
27. Brown F. D. "I.Chem.Soc." 1, 304, (1881).
28. Bowman L. K., Bryant R. C. "Ind.Engng.Chem." 39, 745 (1947)
29. Jacsowon M. A., Smith W., "Proc. ray. Soc." A, 225 (1954).
30. Voetter H. "Plant and Process Dynamic Characteristics" p73 (1957).
31. Marshall W. R., Pigford R. L., "The application of Differential education to Chemical Engineering Problems" P 144 (1947).
32. Wilkingson W. L., and Armstrong W. D. "Chem. Engng.Sci." 7, 1 (1957).
33. Системотехники (сборник трудов II-го Всесоюзного симпозиума, 7-9 июня 1972г.) Выпуск II, Ленинград, 1972.
34. Тихонов А. Н. "О зависимости решений дифференциальных уравнений от малого параметра". 1948, Мат.сб. 22 (64), 193-204.

Электронную версию препринта подготовили:
А. Н. Панкратов, М. М. Ольшевец, И. В. Флоринский
(Институт математических проблем биологии РАН)

Редактирование не проводилось (за исключением опечаток)

Проект «Электронные ИГМ-препринты А. М. Молчанова»
Координатор проекта: И. В. Флоринский
iflorinsky@yahoo.ca

Пушино
2012