

УДК 681.5:519.6

© 2012 г. Г.Б. Диго,
Н.Б. Диго,
А.Ю. Торгашов, д-р техн. наук
(Институт автоматизации и процессов управления ДВО РАН, Владивосток)

ПОСТРОЕНИЕ МОДЕЛИ ПРЕДЕЛЬНОГО РЕЖИМА ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ МАССООБМЕННОГО ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА¹

Предложена структура модели для описания предельных режимов функционирования массообменных технологических процессов, протекающих в ректификационных колоннах, характеризующихся чрезмерным уносом жидкости на вышележащие ступени разделения и снижением эффективности массообмена. Основу модели составляет нелинейная алгебро-дифференциальная система, учитывающая уменьшение коэффициента полезного действия ступени разделения из-за уноса жидкости.

Ключевые слова: массообменные процессы, ректификационная колонна, модель предельного режима функционирования.

Введение

При управлении массообменными технологическими процессами одна из важных проблем состоит в построении математических моделей предельных режимов функционирования. Под предельным режимом понимается приближение технологического процесса к состоянию захлебывания (накоплению жидкости в колонне, характеризующему резким падением эффективности массообмена на ступенях разделения [1]).

В мировой практике в настоящее время для описания приближения к состоянию захлебывания массообменного технологического процесса проводятся гидравлические испытания контактных устройств колонн на пилотных установках, в результате которых определяются критические нагрузки ступеней разделения (контактных устройств) по жидкости и пару, обеспечивающие входение колонны в предельный режим захлебывания. По результатам испытаний оцениваются корреляционные связи, по которым удается лишь довольно грубо оценивать приближение массообменного процесса в колонне к захлебыванию. При этом его динамика, как и динамика изменения эффективности массообмена в около предельном режиме, обычно не рассматривается [2]. Кроме того, в реальных услови-

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ-ДВО РАН 11-08-98500-р_восток_а «Математическое моделирование предельных режимов функционирования массообменных технологических процессов для задач управления».

ях проверить стационарный режим, соответствующий 100-процентному приближению к захлебыванию, не представляется возможным, поскольку начало данного предельного режима распознается только по динамике температур и расходам внутренних и внешних потоков колонн. В то же время математическое описание динамики приближения парожидкостных потоков в колонне к состоянию захлебывания позволило бы уже на ранней стадии избегать нарушений по качеству получаемых продуктов массообменного аппарата. Кроме того, создание моделей, на основе которых можно оценивать изменение эффективности массообмена на каждом такте управления, является актуальной задачей для практических целей.

В статье рассматривается задача построения математических моделей предельных режимов функционирования массообменных процессов, протекающих в ректификационных колоннах. В отличие от исследований, проводимых ранее, учитывается динамика изменения коэффициента полезного действия в зависимости от величины уноса жидкости на тарелках.

Постановка и анализ задачи

Рассматривается массообменный технологический процесс ректификации, протекающий в промышленном аппарате колонного типа. Для встречного движения паровой и жидкой фаз существует некоторая предельная скорость пара, при которой гравитационные силы, обеспечивающие движение жидкости вниз колонны, не в состоянии преодолеть скоростной напор поднимающегося вверх пара. С увеличением скорости пара жидкость сначала замедляет свою скорость течения вниз, а затем просто останавливается и начинает накапливаться в ее ректификационной части. Таким образом, в колонне наступает предельный режим ее функционирования, т.е. происходит захлебывание, являющееся крайне нежелательным режимом работы оборудования, поскольку сначала жидкость заполняет внутреннюю полость ректификационной части колонны, а затем происходит ее аварийный сброс. Поэтому ставится задача разработки моделей предельных режимов функционирования массообменных процессов, протекающих в ректификационных колоннах тарельчатого типа.

Требования, предъявляемые к разрабатываемой модели, заключаются в выборе ее структуры и учете изменения коэффициента полезного действия (КПД) ступеней разделения при возрастающем уносе жидкости с парами. Для достижения поставленной цели выбран метод построения математических моделей [2] на основе нелинейных алгебро-дифференциальных систем (НАДС). Этот выбор обоснован возможностью интеграции таких моделей в систему управления, так как численное решение НАДС может быть осуществлено в темпе реального времени для построения прогнозной траектории приближения массообменного процесса к предельному режиму захлебывания.

Построение модели предельного режима функционирования массообменного технологического процесса

Взаимодействие движущихся навстречу газовой (паровой) и жидкой фаз осуществляется на специальных контактных устройствах (тарелках), располо-

женных внутри аппарата через определенное расстояние. Количество жидкости на некоторой j -й тарелке тесно связано с режимом потока (рис.1). Во время нормальной эксплуатации тарелки режим потока обычно соответствует струйному режиму или режиму вспенивания. Массообменный процесс в струйном режиме ассоциируется с низкими гидравлическими нагрузками, небольшими объемами аккумулируемой жидкости, высокими насыщениями паром и низким рабочим давлением. Наоборот, процесс в режиме вспенивания пользуется преимуществом при средневысоких гидравлических нагрузках, а также высоких и низких нагрузках парообразования при нормальном давлении [3-4]. В промышленных колоннах существует третий режим эмульгирования потока, который возникает при низких паровых нагрузках и высоком рабочем давлении. На рис. 1 показаны материальные потоки жидкости и пара, относящиеся к j -й тарелке.

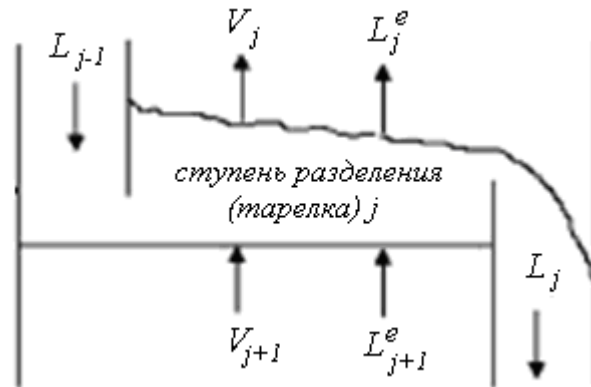


Рис. 1. Материальные потоки, относящиеся к j -й тарелке.

Построение моделей объектов химической технологии начинается с составления уравнений материального баланса. Так, для j -й ступени i -го компонента массообменного процесса уравнения баланса имеют вид (описание используемых обозначений сведено в отдельный раздел в конце статьи для удобства чтения):

$$\frac{d(M_j x_{ji})}{dt} = V_{j+1} y_{j+1,i} + L_{j-1} x_{j-1,i} + L_{j+1}^e x_{j+1} - V_j y_{ji} - (L_j + L_j^e) x_{ji}. \quad (1)$$

Общий материальный баланс:

$$\frac{dM_j}{dt} = V_{j+1} + L_{j-1} + L_{j+1}^e - V_j - L_j - L_j^e. \quad (2)$$

Из очевидного равенства

$$\frac{d(M_j x_{ji})}{dt} = x_{ji} \frac{dM_j}{dt} + M_j \frac{dx_{ji}}{dt}, \quad (3)$$

с учетом (2) и (3), уравнение (1) принимает вид

$$\frac{dx_{ji}}{dt} = (V_{j+1} y_{j+1,i} + L_{j-1} x_{j-1,i} + L_{j+1}^e x_{j+1} - V_j y_{ji} - (L_j + L_j^e) x_{ji} - (V_{j+1} + L_{j-1} + L_{j+1}^e - V_j - L_j - L_j^e) x_{ji}) / M_j. \quad (4)$$

Для тарельчатых колонн важным показателем является уровень жидкости на тарелках, он рассматривается как параметр в вычислении перепада давления каждой тарелки. При вычислении расхода жидкости на j -й тарелке в зависимости

от типа режима потока жидкости (струйного, пенообразования, эмульгирования) используются различные уравнения [2].

Расход жидкости L_j определяется соответственно из выражений:

для струйного режима

$$L_j = (0.09625 \cdot n_L I_W N_{Rj}) \cdot \left[\frac{1}{A_t^{1.79}} \left(\frac{0.29 n_L A_T A_t^{-0.791} d_o^{0.833}}{12000 M_j} \cdot \left(\frac{62.2}{r_{L,j}} \right)^{0.5(1-n)} - 1 \right) \right]^{-1/0.59}, \quad (5)$$

где $n = 0.0231 d_o A_t$;

для режима пенообразования

$$L_j = (0.09625 \cdot n_{L,j} I_W N_{Rj}) \cdot \left[\frac{1}{11.07 C} \left(\frac{12000 M_j}{n_{L,j} A_T j} - h_W \right) \right]^{3/2}, \quad (6)$$

где $C = 0.0327 + 0.0286 \exp(-3.5 h_W)$,

$$j_j = \exp(-4.26 K_{S,j}^{0.91}); \quad K_{S,j} = v_{a,j} \left(\frac{r_{G,j}}{r_{L,j} - r_{G,j}} \right)^{1/2};$$

для режима эмульгирования

$$L_j = (0.00802 \cdot n_{L,j} I_W N_P) \cdot \left(\frac{12000 M_j / A_T n_L - h_W}{0.092 F_W} \right)^{1.5}. \quad (8)$$

Кроме вышеприведенных уравнений материального баланса, в систему НАДС включаются уравнения для парового потока V_j , полученные исходя из энергетического (теплового) баланса:

$$V_j = \frac{V_{j+1} H_{j+1}^V + L_{j-1} H_{j-1}^L + L_{j+1}^e H_{j+1}^L - (L_j + L_j^e) H_j^L}{H_j^V}. \quad (9)$$

Величина парового потока, определяемого выражением (9), является ключевым фактором при описании динамики приближения массообменного процесса к предельному состоянию захлебывания в технологическом аппарате, которое порождается чрезмерным уносом жидкости с паром (унос пропорционален расходу пара). В реальных условиях жидкость и пар, покидающие ступень разделения, находятся не в состоянии равновесия, поэтому массообменный процесс не заканчивается полностью на j -й тарелке, а система НАДС дополняется уравнениями равновесия между жидкой и паровой фазами, учитывающими КПД ступеней разделения по Мэрфри:

$$E_{i,MV} = \frac{y_{i,j} - y_{i,j-1}}{y_{i,j}^* - y_{i,j-1}}, \quad (10)$$

где $y_{i,j}^* = f(x_{i,j}, T_j, P_j)$;

$$(11)$$

$$y_j P = x_i P_i^S g_i \Rightarrow y_i = \frac{x_i P_i^S g_i}{j_i P}. \quad (12)$$

При вычислении коэффициента активности g_i в жидкой фазе используется уравнение UNIQUAC (сокращенное название от UNIversal QUAsi Chemical – универсальное квазихимическое), применяемое для представления равновесия пар – жидкость и жидкость – жидкость в многокомпонентных смесях при использовании только параметров бинарного взаимодействия и данных о чистых компонентах [5]. Коэффициент фугитивности j_i из (12) вычисляется с помощью уравнения состояния Пенга–Робинсона [6].

При достижении сбалансированности пара и жидкости на тарелке приходится оценивать частичную степень равновесия, достигаемую реальной тарелкой, вводя в рассмотрение локальную точку или точку эффективности массопереноса (массообмена) в конкретном месте на ее поверхности. В данном случае используется локальная эффективность по Мэрффри, задаваемая формулой

$$E_{i,OV} = \frac{y_{i,j,Local} - y_{i,j-1,Local}}{y_{i,j,Local}^* - y_{i,j-1,Local}}, \quad (13)$$

а для расчета КПД следующее уравнение [2]:

$$E_{OV,j} = 1 - \exp\left(-\frac{0.0029}{1 + mn_V / n_L \sqrt{D_V(1-j)D_L(A_h/A_a)}} \cdot \text{Re}_{Fe,j}^{0.4136} \left(\frac{h_C}{d_o}\right)^{0.6074} \left(\frac{A_h}{A_a}\right)^{-0.3195}\right). \quad (14)$$

$$\text{где } \text{Re}_{Fe,j} = \frac{r_{V,j} v_o h_C}{m_{V,j} j_j}. \quad (15)$$

Поскольку не всегда разделяемые смеси полностью растворимы друг в друге, надо учитывать эффект частичного перемешивания жидкости на тарелке

$$E_{MV,j} = E_{OV,j} \frac{1 - \exp[-(h_j + Pe_L)]}{(h_j + Pe_L)[1 + (h_j + Pe_L)/h]} + \frac{\exp(h_j) - 1}{h_j[1 + h_j/(h_j + Pe_L)]}, \quad (16)$$

$$\text{где } h_j = Pe_L / 2 \left[\left(1 + \frac{4I_j E_{OV,j}}{Pe_L} \right)^{1/2} - 1 \right], \quad (17)$$

$$I_j = mV_j / L_j, \quad (18)$$

$$Pe_L = \frac{4q_L r_W^2}{A_a h_C / 12 D_{E,L}}, \quad (19)$$

$$D_{EL} = 4 \cdot 10^{-4} [gh_{2r,j}^3]^{0.5}. \quad (20)$$

Высота парожидкостного слоя $h_{2r,j}$ на j -й тарелке находится из уравнения:

$$h_{2r,j} = h_C / j_j + 7.79 \left[1 + 0.72(d_o / h_C)^{1.85} \right] \cdot \frac{K_{S,j}^2}{j_j \cdot g \cdot (A_h / A_a)}. \quad (21)$$

Если жидкость на тарелке совсем не перемешивающаяся, то

$$E_{MV,j} = 1/I_j \cdot [\exp(I_j \cdot E_{OV} - 1)]. \quad (22)$$

В случае частично смешивающихся потоков пара и жидкости:

$$E_{MV,Unmixed,j} = E_{MV,Mixed,j} \cdot (1 - 0.0335 \cdot I^{1.073} \cdot E_{OV}^{2.518} Pe_L^{0.175}), \quad (23)$$

где $Pe_V = \frac{4 \cdot V \cdot r_W^2}{D_{EV} \cdot A_a \cdot (S_t - h_{2r,j})}$; $A_a = A_T - 2A_d$.

По мере приближения массообменного технологического процесса к предельному режиму возникает чрезмерный унос жидкости с паром на вышележащие тарелки, приводящий к потере качества продуктов ректификационной колонны. Обычно при расчете динамики массообменного процесса не учитывается доля уноса жидкости с тарелки, поэтому предлагается в системе уравнений материального баланса определять величину уноса жидкости L_j^e по результатам гидравлических расчетов отдельно взятой ступени разделения согласно выражению

$$L_j^e = 0.00335 V_j \left(\frac{h_{2r,j}}{t} \right)^{1.1} \left(\frac{r_{L,j}}{r_{G,j}} \right)^{0.5} \left(\frac{h_t}{h_{2r,j}} \right)^q, \quad (24)$$

где показатель степени $q = 0.5[1 - \text{th}(1.3 \ln(h_j/d_0) - 0.15)]$. Следует отметить, что выражение (24) взято из [7], оно не применялось для расчета динамики ректификационной колонны. Окончательное выражение для эффективности ступени разделения с учетом уравнения (24) имеет вид

$$E_{MVE,j} = E_{MV,j} = \left[1 - \frac{0.8 E_{OV,j} I_j^{1.543} (L_j^e / V_j)}{m} \right]. \quad (25)$$

Полученная в результате алгебро-дифференциальная система не имеет аналитического решения, поэтому приходится использовать многошаговые неявные численные методы. В данном случае для решения системы (1)-(25) представляется целесообразным применять метод Гира [8].

Условные обозначения: A – площадь поверхности тарелки (м^2); A_t – отношение площади отверстия к площади контакта фаз на тарелке; C – параметр Venett; d – диаметр колонны (м); D – коэффициент массопереноса; E – эффективность тарелки; L^e – величина уноса жидкости (кмоль/ч); F – молярный расход питания (кмоль/ч); F_w – коэффициент Френсиса; h – энтальпия (kJ – килоджоули); h_c – уровень светлой жидкости (м); h_d – перепад давления в сливном стакане (м); h_{dt} – сухой перепад давления на тарелке (м); h_t – перепад давления на тарелке (м); h_w – уровень жидкости над сливной перегородкой (м); H – молярная энтальпия (кмоль/ч); H_d – уровень жидкости в сливном патрубке (м); K – константа фазового равновесия; L_w – длина сливной перегородки (м); L – молярная скорость жидкости (кмоль/ч); M – молярная задержка (кол-во жидкости) на тарелке (кмоль); m – локальный наклон кривой равновесия; n – молярная плотность (кмоль/м^3); P – давление в колонне (атм.); S_t – расстояние между тарелками (м); T – колонна; x – молярный состав жидкости; y – молярный состав пара; V – расход пара (кмоль/ч); j – параметр плотности пены; r – массовая плотность (кг/м^3).

Список нижних индексов: i – номер компонента; j – номер тарелки; E – эффективность; L – жидкость; o – отверстие, выход; t – тарелка; w – сливная перегородка.

Заключение

В результате проведенных исследований предложена структура модели, описывающей приближение массообменного технологического процесса к состоянию захлебывания и учитывающей изменение эффективности ступеней разделения из-за уноса жидкости. Такая модель распространяется на случаи работы контактных устройств в струйном и пенном режимах, а также при возникновении режима эмульгирования и при взаимодействии частично смешиваемых потоков жидкости и пара.

Применение аппарата НАДС обосновано возможностью интеграции таких моделей в систему управления, поскольку численное решение такой системы может осуществляться в темпе реального времени для построения прогнозной траектории приближения массообменного процесса к предельному режиму захлебывания.

В дальнейшем будет проведен анализ идентифицируемости параметров модели предельного режима массообменного технологического процесса.

ЛИТЕРАТУРА

1. Касаткин А.Г. Основные процессы и аппараты химической технологии. – М.: Химия, 1973.
2. *Rigorous dynamic simulation of industrial tray column, considered liquid flow regime and efficiency of trays* / H. R. Mahdipoor, M. Shirvani, M. R. Jafari Nasr, S. Shakiba // Trans IChemE, Part A: Chemical Engineering Research and Design. – 2007. - Vol. 85(A8). – P. 1101–1111.
3. *Wijn E. F. Weir Flow and Liquid Height on Sieve and Valve* // Trays. Chem. Eng. J. – 1999. – Vol. 73, Is. 3. – P. 191-204.
4. *Wijn E. F. On The Lower Operation Range on Sieve and Valve* // Trays. Chem. Eng. J. – 1998. – Vol. 70, Is. 2. – P. 143-155.
5. *Abrams D.S., Prausnitz J.M. Statistical Thermodynamics of Liquid Mixtures: A New Expression for the Excess Gibbs Energy of Partly or Completely Miscible Systems.* // AIChE J. – 1975. – Vol. 21. – P. 116-128.
6. Уэйлес С. Фазовые равновесия в химической технологии: В 2-х ч. 1. / пер. с англ. — М.: Мир, 1989.
7. *Bennett D.L., Kao A.S., Wong L.W. A mechanistic analysis of sieve tray froth and entrainment* // AIChE J. - 1995. – Vol. 41, Is. 9. – P. 2067-2082.
5. *Gear C. W. Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations.* – Prentice-Hall: Englewood Cliffs, NJ, 1971.

Статья представлена к публикации членом редколлегии О.В. Абрамовым.

E-mail:

Диго Галина Борисовна – bernatsk@iacp.dvo.ru;

Диго Наталья Борисовна – digo@iacp.dvo.ru;

Торгашов А.Ю. – torgashov@iacp.dvo.ru.