

4-28-2018

## Method of calculation of static regime of rectification columns for optimization of constructive and technological parameters on MathCAD Prime 3.0.

D.P Muxitdinov

*Doctor of Technical Sciences, Professor, Department of Automation of Production Processes, Tashkent State Technical University, Tel.: (+99894)604-23-80 (M.);*

Yo.B Kadirov

*Senior Lecturer, Department of Automation and Control, Navoi State Mining Institute, Тел.: (+99891)338-29-22 (M.),, navdki@mail.ru*

Follow this and additional works at: <https://uzjournals.edu.uz/ijctcm>

 Part of the [Engineering Commons](#)

---

### Recommended Citation

Muxitdinov, D.P and Kadirov, Yo.B (2018) "Method of calculation of static regime of rectification columns for optimization of constructive and technological parameters on MathCAD Prime 3.0.," *Chemical Technology, Control and Management*: Vol. 2018 : Iss. 1 , Article 17.

DOI: <https://doi.org/10.34920/2018.1-2.95-108>

Available at: <https://uzjournals.edu.uz/ijctcm/vol2018/iss1/17>

This Article is brought to you for free and open access by 2030 Uzbekistan Research Online. It has been accepted for inclusion in Chemical Technology, Control and Management by an authorized editor of 2030 Uzbekistan Research Online. For more information, please contact [sh.erkinov@edu.uz](mailto:sh.erkinov@edu.uz).

---

## Method of calculation of static regime of rectification columns for optimization of constructive and technological parameters on MathCAD Prime 3.0.

### Cover Page Footnote

Tashkent State Technical University, SSC «UZSTROYMATERIALY», SSC «UZKIMYOSANOAT», JV «SOVPLASTITAL», Agency on Intellectual Property of the Republic of Uzbekistan



ISSN 1815-4840

Himičeskaâ tehnologiâ. Kontrol' i upravlenie

**CHEMICAL TECHNOLOGY.  
CONTROL AND MANAGEMENT**2018, №1-2 (79-80) pp. 95-108. <https://doi.org/10.34920/2018.1-2.95-108>International scientific and technical journal  
journal homepage: <https://uzjournals.edu.uz/ijctcm/>

Since 2005

УДК:66.048

Д.П.МУХИТДИНОВ (ТГТУ), Ё.Б.КАДИРОВ (НавГГИ)

**МЕТОДИКА РАСЧЕТА СТАТИЧЕСКОГО РЕЖИМА РЕКТИФИКАЦИОННЫХ КОЛОНН  
ДЛЯ ЗАДАЧ ОПТИМИЗАЦИИ КОНСТРУКТИВНЫХ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ  
ПАРАМЕТРОВ НА MathCAD Prime 3.0.**

*Ректификациялаш жараёнининг статикасини ҳисоблаш услуги кўриб чиқилган. MathCAD Prime 3.0 дастуридаги моддий ва иссиқлик балансларини ҳисоблаш усули келтирилган. Таклиф қилинаётган услубият колоннадаги босимни ҳисоблашни назарда тутуди, дистиллят бугининг тўлиқ конденсацияланишидаги ҳароратни олдиндан аниқлашга асосланган, бунинг мураккаблиги мувозанат ўзгармасларининг ҳароратга боғлиқлигининг чиқиқлиги билан белгиланади. Кўп компонентли ректификациялаш жараёнларида минимал ва ишчи флегма сонини Андервуд тенгламалари бўйича ҳисобланган. Колоннанинг назарий тарелкалар сонини ҳисоблаш амалга оширилган ва таъминот тарелкасининг жойлашиши аниқланган.*

**Таянч сўзлар:** математик модель, ректификациялаш колоннаси, бинар аралашма, флегма сони, буг фазаси, ректификациялаш жараёни статикаси ҳисоби, моддий баланс, иссиқлик баланси, итерация усули.

*Предложена методика расчета статики процесса ректификации. Приведен метод расчета материального и теплового балансов в программе MathCAD Prime 3.0. Предлагаемая методика предусматривает расчет давления в колонне, основанный на предварительном определении температуры полной конденсации паров дистиллята, сложность которого обусловлена нелинейным характером зависимости констант равновесия от температуры. По уравнениям Андервуда рассчитаны минимальное и рабочее флегмовое число в процессах многокомпонентной ректификации. Произведен расчёт теоретического числа тарелок колонны и определено положение тарелки питания.*

**Ключевые слова:** Математическая модель, ректификационная колонна, бинарная смесь, флегмовое число, паровая фаза, расчет статики процесса ректификации, материальный баланс, тепловой баланс, итерационный метод.

*The calculation of the statics of the rectification process is considered. The method of calculating the material and heat balances in the program MathCAD Prime 3.0 is presented. The proposed method involves calculating the pressure in a column based on the preliminary determination of the temperature of the total condensation of distillate vapors, the complexity of which is due to the nonlinear character of the dependence of the equilibrium constants on temperature. According to the Underwood equations, the minimum and working reflux ratio is calculated in the processes of multicomponent rectification. The theoretical number of plates of the column is calculated and the position of the food plate is determined.*

**Key words:** mathematical model, rectification column, binary mixture, reflux ratio, vapor phase, calculation of statics of rectification process, material balance, heat balance, iterative method.

В основу расчета положена математическая модель, разработанная в работе [1]. При построении этой модели стационарного режима работы ректификационной колонны приняты следующие допущения: исходная бинарная смесь и флегма подаются в колонну в виде жидкости при температуре кипения; расход пара по высоте колонны постоянный; расход жидкости по высоте укрепляющей секции колонны постоянный; расход жидкости по высоте исчерпывающей секции колонны постоянный; в паровой фазе в зоне массообмена принимается полное вытеснение, а в жидкой фазе – полное перемешивание.

Уравнения материального баланса для части ректификационной колонны, расположенной ниже тарелки питания, имеют вид:

для куба колонны:

$$(L + F)x_1 - Vy_0 - Wx_y = 0; \quad (1)$$

$$(L + F)(x_{i+1} - x_i) + V(y_{i+1} - y_i) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, f - 1, \quad (2)$$

для тарелки питания:

$$Fx_F + Lx_{f+1} - (L + F)x_f + V(y_{f-1} - y_f) = 0, \quad i = f, \quad (3)$$

для верхней части колонны: ( $f < i \leq N$ ):

$$L(x_{i+1} - x_i) + V(y_{i+1} - y_i) = 0, \quad i = f + 1, f + 2, \dots, N; \quad (4)$$

для дефлегматора

$$Vy_N - (L + D)x_{N+1} = 0, \quad (5)$$

где:  $F$  – количество исходной смеси,  $D$  – отбор дистиллята,  $W$  – отбор кубового продукта,  $V$  – количество пара, уходящего с тарелки,  $L$  – количество жидкости, стекающей с тарелки, кмоль/ч;  $x_F$  – концентрация низкокипящего компонента (НКК) в питании,  $x_0$ ,  $x_{N+1}$  – концентрации НКК в кубовом продукте и дистилляте,  $x_i$  – концентрация НКК в жидкости, стекающей с  $i$ -ой тарелки,  $y_i$  – концентрация НКК в паре уходящего с  $i$ -ой тарелки, мольные доли [2].

Коэффициент полезного действия тарелки определялся в терминах к.п.д. Мерффри [3]:

$$\eta_i = (y_i - y_{i-1}) / (y_i^* - y_{i-1}), \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (6)$$

где  $\eta_i$  – к.п.д. Мерффри,  $y_i^*$  – концентрация НКК в паре, равновесном с жидкостью состава  $x_i$ , покидающей тарелку, мол. доли

Из выражения (6) определяется концентрация НКК в паровой фазе  $y_i$ :

$$y_i = y_{i-1} + \eta(y_i^* - y_{i-1}), \quad (7)$$

где  $\eta$  – среднее значение к.п.д.

Расчет равновесных составов в паровой фазе производился по уравнению

$$y_i^* = \alpha_i x_i / (1 + (\alpha_i - 1)x_i), \quad (8)$$

где  $\alpha_i$  – коэффициент относительной летучести разделяемой смеси на  $i$ -ой тарелке.

Принимая во внимание, что в кубе колонны

$$y_0 = x_0, \quad (9)$$

в конденсаторе

$$y_N = x_{N+1} \quad (10)$$

и, используя уравнения общего материального баланса колонны,

$$F = D + W, \quad (11)$$

$$L = RD = V - D, \quad (12)$$

$$Fx_F = Dx_{N+1} + Wx_0, \quad (13)$$

получим математическое описание стационарного режима работы ректификационной колонны.

В выражении (12)  $R$  – флегмовое число.

Решением системы уравнений (1) – (13) определяют значения концентраций НКК на тарелках и в продуктах разделения. [4]

Для расчета статики процесса разработана процедура «Расчет статики процесса ректификации» (РСПР). В качестве независимых переменных выбраны концентрация жидкой фазы в кубе колонны  $x_0$  и флегмовое число  $R$ . При необходимости регулирования чистоты верхнего и нижнего продуктов или обоих потоков одновременно, надлежит варьировать количеством флегмы

и нагрузкой кипятильника по пару. Определяемыми являются величины флегмового числа и концентрации компонентов жидкой фазы в дефлегматоре:  $D, x_{N+1}$ .

1. Из уравнения общего материального баланса (11) определяется концентрация НКК в дистилляте  $x_{N+1}$ :

$$\bar{x}_{N+1} = (Fx_F - (F - D)x_0) / D, \quad (14)$$

2. Подбором величины отбора дистиллята  $D$  из формулы (14) рассчитывается концентрация НКК в дистилляте  $x_{N+1}$ .

3. По уравнениям материального баланса (11), (12) рассчитываются величины отборов кубового продукта  $W$  и потока орошения  $L$ .

4. По уравнениям (1) – (8) рассчитываются значения концентраций жидкой фазы на тарелках колонны и дефлегматоре  $x_i$  ( $i = 1, 2, \dots, N + 1$ ); при этом  $y_0 = x_0$ .

Концентрация жидкой фазы на первой ступени рассчитывается по уравнению (1):

$$x_1 = (Vy_0 + Wx_0) / (L + F) = 0.$$

Равновесная с ней концентрация НКК в паровой фазе рассчитывается по уравнению

$$y_1^* = \frac{\alpha_1 x_1}{1 + (\alpha_1 - 1)x_1},$$

далее из выражения (7) рассчитывается концентрация НКК в паровой фазе  $y_i$ :

$$y_1 = y_0 + \eta(y_1^* - y_0).$$

Подобные расчеты производятся для каждой тарелки и дефлегматора  $x_{N+1}$ :

$$x_{N+1} = \frac{1}{L + D} Vy_N.$$

5. При правильном подборе величины отбора дистиллята  $D$  значение концентрации НКК в дистилляте  $x_{N+1}$  должно равняться  $\bar{x}_{N+1}$ , рассчитанной по формуле (14). Если это равенство не будет выполнено, то значение  $D$  необходимо изменять до выполнения условия

$$|x_{N+1} - \bar{x}_{N+1}| \leq \varepsilon.$$

Подбор величины  $D$  производится в следующем порядке: если  $x_{N+1} > \bar{x}_{N+1}$ , то

$$D_{\Pi}^{(k+1)} = D_{\Pi}^k,$$

а левая граница остается прежней, далее повторяется расчет при новом среднем

$$D^{(k+1)} = (D_{\Pi}^{(k+1)} + D_{\Pi}^{(k+1)}) / 2.$$

Если же  $x_{N+1} < \bar{x}_{N+1}$ , то  $D_{\Pi}^{(k+1)} = D_{\Pi}^{(k)}$  а правая – остается прежней.

В результате расчета статики процесса при некотором флегмовом числе  $R$  определяется значение  $D$ , которое обеспечивает выполнение условия баланса [1].

**Расчёт материального баланса.** При расчёте наиболее простым и удобным средством для вычислений является программа MathCAD Prime 3.0. Для расчёта материального баланса ректификационной колонны необходимо предварительно перевести составы из массовых долей в мольные [3]. С этой целью в MathCAD создаются функции для расчёта, при вызове которых будут рассчитываться соответствующие значения искомых величин. Они задаются следующим образом [5]:

$$\text{— состав питания: } cM_i := \frac{c_i}{M_i}; \quad c_i := \sum_i cM_i; \quad (15)$$

$$\text{— состав дистиллята: } yM_i := \frac{y_i}{M_i}; \quad y_i := \sum_i yM_i; \quad (16)$$

$$\text{— состав куба: } xM_i := \frac{x_i}{M_i}; \quad x_i := \sum_i xM_i. \quad (17)$$

Здесь:  $c_i$ ,  $y_i$ ,  $x_i$  – концентрация  $i$ -го компонента в питании, дистилляте и кубе соответственно,  $M_i$  – молярная масса компонента,  $cM_i$ ,  $yM_i$ ,  $xM_i$  – промежуточные переменные, введённые для удобства при расчёте.

Для перевода расходов из массовых в мольные используются соотношения, которые также вводятся в рабочее поле MathCAD в виде функций:

$$F := F / \sum_{i=1}^n (c_i M_i); \quad (18) \quad D := D / \sum_{i=1}^n (y_i M_i); \quad (19) \quad W := W / \sum_{i=1}^n (x_i M_i). \quad (20)$$

Здесь:  $F, D, W$  – переменные, введённые для обозначения расхода питания, дистиллята и куба соответственно.

При расчёте материального баланса многокомпонентной ректификации, как правило, известен состав и количество питания колонны. Требуется найти состав и количество дистиллята и кубового остатка. Для этого необходимо описать требуемые составы дистиллята и кубового остатка. Из всех компонентов выбираются лёгколетучий ключевой компонент ((ЛКК) – это самый лёгкий из всех компонентов, содержащихся в кубовом остатке) и труднолетучий ключевой компонент (ТКК – это самый тяжёлый из всех компонентов, содержащихся в дистилляте) в зависимости от того, какой компонент необходимо получить в дистилляте и кубовом остатке с заданным составом. Содержанием компонентов в дистилляте более тяжёлых, чем ТКК, а также содержанием компонентов в кубовом остатке более лёгких, чем ЛКК, пренебрегают. Ключевые компоненты должны быть соседними. При этом должны выполняться условия: индекс  $t_{kk} = l_{kk} + 1$ ; для  $1 \leq i < l_{kk}$ ; для  $t_{kk} < i \leq n$ ; где  $1 \leq i < n$ . Здесь  $t_{kk}$  и  $l_{kk}$  – индексы для ТКК и ЛКК соответственно. Материальный баланс простой ректификационной колонны записывается в следующем виде:

$$F = D + W, \quad (21)$$

где  $F$ ,  $D$  и  $W$  – расходы соответственно по сырью, дистилляту и кубовому остатку.

Покомпонентный материальный баланс для системы из  $n$  компонентов имеет вид:

$$\sum_{i=1}^n F \cdot c_i = \sum_{i=1}^{tkk} D \cdot y_i + \sum_{i=lkk}^n W \cdot x_i, \quad (22)$$

где  $c_i$ ,  $y_i$ ,  $x_i$  – составы питания, дистиллята и кубового остатка соответственно,  $tkk$  и  $lkk$  – индексы для ТКК и ЛКК. Для решения системы уравнений материального баланса требуется, чтобы количество неизвестных переменных равнялось количеству уравнений, но в большинстве случаев, когда известны состав и количество питания и заданы ключевые компоненты, количество переменных всегда будет на единицу больше, чем число уравнений, т.е. система уравнений не имеет однозначного решения, поэтому систему дополняют условием разделения:  $\sum x_i = 1$  или  $\sum y_i = 1$  [2].

Для решения системы уравнений в среде MathCAD необходимо:

– ввести начальные приближения неизвестных величин и ограничения на количество дистиллята, составы дистиллята и куба;



где  $P$  – давление в системе (в данном случае за давление в системе принимается давление в ёмкости для орошения);  $p_i$  – парциальное давление насыщенных паров  $i$ -го компонента, переписывается в виде:

$$\sum_{i=1}^I \frac{p_i y_i}{P} = 1. \quad (28)$$

Для решения уравнения (14) необходимо заменить  $p_i$  на аналитическую зависимость, описывающую изменение  $p_i$  в зависимости от температуры. Существует большое количество различных расчётных формул, описывающих изменение давление насыщенных паров веществ в зависимости от температуры: уравнение Антуана, Риделя, Дюринга, Трегубова, Ашворта и др. Самым простым соотношением для описания зависимости упругости паров от температуры является

уравнение Антуана  $p_i = e^{\frac{A_i - B_i}{C_i + T}}$  [2]. В MathCAD это соотношение можно задать при помощи создания функции  $P_0(i, T)$ , при вызове которой будут рассчитываться соответствующие значения давления насыщенного пара  $P_0$  (в мм рт. ст.). Функция задаётся следующим образом:

$$P_0(i, T) := \exp\left(A_i - \frac{B_i}{C_i + T}\right), \quad (29)$$

где  $A_i$ ,  $B_i$ ,  $C_i$  – константы для  $i$ -го компонента, зависящие от природы вещества (константы уравнения Антуана) — берутся из справочников;  $T$  – температура, при которой вычисляется давление насыщенного пара вещества (в градусах Кельвина).

Для использования данного уравнения необходимо перевести размерность давления из мм рт. ст. в технические атмосферы, 1 кгс/кв.см (ат.) с помощью функции:

$$P(i, T) := \frac{P_0(i, T)}{735} \quad (30)$$

Затем необходимо задать переменную ТК — предполагаемую температуру конденсации паров дистиллята (в градусах Кельвина). Температура выбирается на основании опыта эксплуатации подобных установок (по заводским данным) или исходя из температуры хладагента, подаваемого в теплообменный аппарат, с учётом температурной поправки на полную конденсацию паров дистиллята. Если нет возможности выбрать температуру, то необходимо воспользоваться уравнением (25).

Чтобы определить давление конденсации дистиллята можно воспользоваться графическим методом решения уравнений в среде MathCAD.

Уравнения вида:  $f(x) = \text{const}$  или  $f_1(x) = f_2(x)$  могут быть решены графическим методом, основанным на нахождении точек пересечения графиков, отражающих изменение значения функций левой и правой частей уравнения в заданном интервале, с определением интервала изменения аргумента  $x$ , в котором предположительно находится корень уравнения. Если интервал большой, то не следует задавать слишком частый шаг изменения аргумента  $x$ , так как это приводит к большим затратам времени на решение уравнения и необоснованным затратам оперативной памяти компьютера, а если интервал маленький, то шаг изменения следует выбирать такой, чтобы не пропустить некоторые корни уравнения. Затем определяются две функции, соответствующие левой и правой частям уравнения. Точки пересечения графиков функций  $y_1(x)$  и  $y_2(x)$  будут корнями уравнения  $f_1(x) = f_2(x)$ .

Изменяя соответствующим образом интервал изменения  $x$  от  $x_1$  до  $x_3$ , а также шаг его изменения  $x_2 - x_1$ , можно найти решение уравнения практически с любой точностью. При наличии нескольких корней их можно найти последовательно.



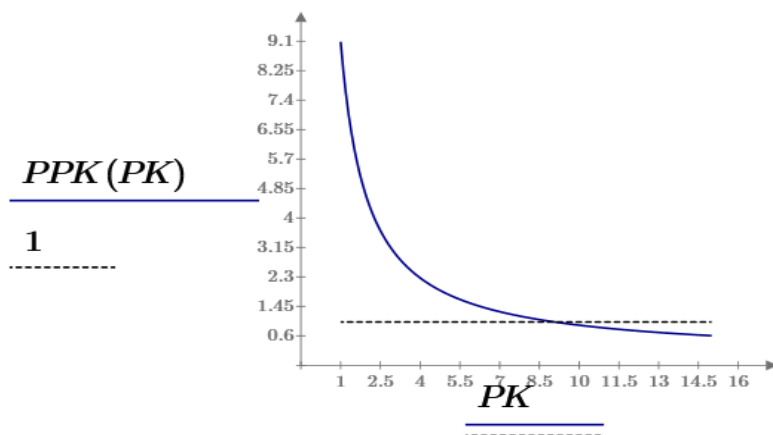


Рис.1. Определение давления конденсации по графику функции изотермы паровой фазы.

Определяется давление конденсации дистиллята по графику функции изотермы паровой фазы (рис.1) при помощи функции, аргументом которой является переменная  $PK$ :

$$PPK(PK) := \sum_{i=1}^n \frac{P(i,TK) \cdot y_i}{PK} \quad (31)$$

где  $PPK$  – имя созданной функции,  $PK$  – переменная, в которой хранится интервал искомого давления, ат.

Интервал в MathCAD задаётся следующим образом:  $PK := a, b, .. c$ , где  $a$  – начальное,  $c$  – конечное значение интервала,  $b$  – шаг.

Уточнение значения давления паров конденсации  $PPK$  производится аналитическим методом решения уравнения в программной среде MathCAD.

В данном методе для решения одного уравнения с одним неизвестным используется функция  $root()$ . Аргументами этой функции являются выражение и переменная, входящая в это выражение. Эта функция находит значение переменной, при которой выражение обращается в ноль, т.е. решается уравнение вида  $F(x)=0$ . Таким образом, функция  $root()$  возвращает значение переменной, которое обращает выражение в ноль.

В общем виде функция  $root()$  записывается:  $root(F(x), x)$  или  $root(F(x), x, x_1, x_2)$ , где  $x$  – имя переменной с заданным начальным приближением искомого корня (обычно находится графическим методом);  $x_1$  и  $x_2$  – интервал, в котором находится корень уравнения  $F(x)$ . [5]

Поскольку поиск ведётся итерационным методом, перед решением следует задать начальное приближение переменной  $x$ , значение которой определяется с помощью функции  $root()$ . Выбор начального приближения влияет на значение найденного корня (если выражение имеет несколько корней). В этом случае их можно найти последовательно, используя функцию  $root()$  при разных начальных приближениях искомой переменной или задавая нужный интервал  $x_1-x_2$ . [MathCAD]

В нашем случае применение этого метода будет выглядеть следующим образом. Сначала присваиваем  $PK:=9$  атм. (по графику из рис.1). Затем применяем процедуру  $root$ :

$$PK := root(PPK(PK)-1, PK). \quad (32)$$

После этого вводим в рабочее поле MathCAD  $PK=$  и получаем точный результат  $PK=9.0849$  атм. (например).

Следует иметь в виду, что в большинстве случаев мы определяем давление  $P$  в ёмкости для орошения колонны. Для преодоления потерь напора при движении пара через трубопроводы и аппараты, расположенные после ректификационной колонны, необходимо, чтобы давление несколько превышало расчётное. Поэтому для нахождения истинного давления в вершине колонны к полученной величине необходимо прибавить сумму гидравлических потерь в трубопроводе от

колонны до ёмкости для орошения. Кроме этого (особенно при использовании вакуумных колонн, применяемых для разделения труднолетучих веществ, а именно такие колонны применяются наиболее часто в промышленности органического синтеза) давление в верху колонны существенно отличается от давления в низу колонны вследствие гидравлического сопротивления тарелок. Поэтому для определения давления в низу колонны следует вносить поправку  $\Delta p$ , равную гидравлическому сопротивлению одной тарелки (рассчитывается, в первом приближении можно использовать ориентировочные значения из таблицы для ориентировочных значений эффективности и гидравлического сопротивления тарелок различных типов), умноженному на общее число тарелок (берётся приближённым и далее в расчёте уточняется) [1].

Если в результате расчёта получено давление, близкое к атмосферному, то в целях упрощения технологического процесса давление в колонне принимается равным атмосферному.

Итак, давление верха колонны (переменная  $PV$ ) с учётом гидравлических потерь для трубопровода вывода паров дистиллята из колонны в конденсатор рассчитывается по соотношению:

$$PV := PK + 0.03, \quad (33)$$

где 0.03 атм. – ориентировочная сумма гидравлических потерь в трубопроводе от колонны до ёмкости для орошения,  $PK$  – переменная для хранения значения давления конденсации дистиллята.

Давление низа колонны (переменная  $PN$ ), учитывая гидравлическое сопротивление тарелок колонны (в первом приближении принимается  $m$  тарелок по 0.005 атм. на 1 тарелку) [6].

$$PN := PV + m \cdot 0.005, \quad (34)$$

где  $m$  – число тарелок.

Давление на тарелке питания (переменная  $PF$ ), учитывая гидравлическое сопротивление тарелок верхней части колонны (в первом приближении принимается  $1.67 \cdot m$  тарелок по 0.005 ат. на 1 тарелку):

$$PF := PV + 1.67m \cdot 0.005. \quad (35)$$

Расчёт температур верха и низа колонны. Расчёт температуры верха колонны осуществляется по графику функции изотермы паровой фазы (рис.2) следующим образом:

$$TTV(TV) := \sum_{i=1}^n \frac{PV \cdot y_i}{P(i, TV)} \quad (36)$$

Здесь  $TV$  – интервал искомой температуры, К.[3]

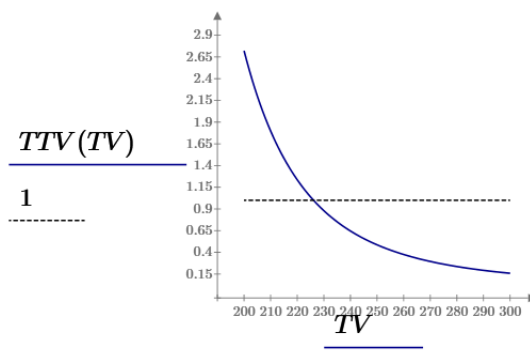


Рис.2. Подбор температуры верха колонны по графику функции изотермы паровой фазы.

Далее уточняем температуру аналитическим методом (см. выше для давления).

Подбор температуры низа колонны производится по графику функции изотермы жидкой фазы (рис.3), определяемой функцией:

$$TTN(TN) := \sum_{i=1}^n \frac{P(i, TN) \cdot x_i}{PN}. \quad (37)$$

Здесь:  $TN$  – интервал искомой температуры низа колонны,  $K$ .

Эту температуру также уточняем аналитическим методом.

**Расчёт доли отгона сырья при подаче его в колонну.** Расчёт доли отгона и составов жидкой и паровой фаз может применяться при определении давления в колонне, температур верха и низа, определения положения тарелки питания, процессов сепарации и многих других случаях.

Сырьё может быть введено в колонну при разной температуре, в связи с чем может изменяться его агрегатное состояние. Если сырьё поступает в паро-жидкостной смеси, то долю отгона  $e = \frac{D}{F}$  можно найти из следующего уравнения [7]:

$$\sum_i \frac{K_i x_{i,F}}{1 + e(K_i - 1)} = 1, \quad (38)$$

где  $K_i$  – константа равновесия компонента,  $e$  – доля отгона при однократном испарении,  $x_{i,F}$  – мольная доля  $i$ -го компонента в питании, находящегося в жидкой фазе [9].

Температура сырья на тарелке питания колонны (переменная  $TF$ ) в первом приближении принимается средней по колонне, далее вводится поправка для получения заданной доли отгона колонны:

$$TF := \frac{TV + TN}{2} - 2. \quad (39)$$

Обычно доля отгона дистиллята подбирается на 10-15% выше, чем доля дистиллята в сырье:

$$\frac{D}{F} \cdot \frac{100+10}{100} \quad \text{или} \quad \frac{D}{F} \cdot \frac{100+15}{100}$$

Подбор мольной доли отгона для сырья осуществляется с помощью функции (рис. 3):

$$EE(E) := \sum_{i=1}^n \frac{c_i}{1 + E \left( \frac{P(i,TF)}{PF} - 1 \right)} \quad (40)$$

$E = 0, 0.01 \dots 1$  – интервал значений для искомой доли отгона.

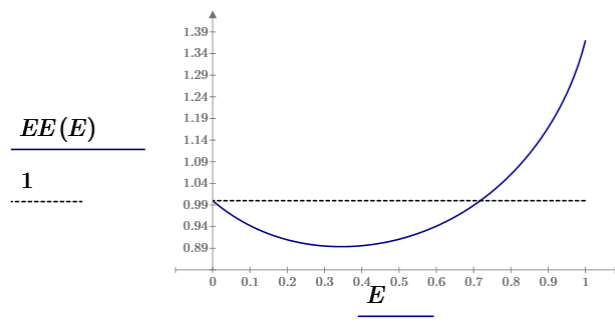


Рис.3. Подбор мольной доли отгона для сырья.

Производим уточнение доли отгона аналитическим методом.

Если вычисленное значение  $E$  занижено или график проходит выше значения 1, то необходимо повысить температуру питания колонны. Если значение  $E$  занижено или график проходит ниже значения 1, то необходимо понизить температуру питания.

Расчёт минимального числа ступеней разделения колонны. Относительные летучести компонентов разделения при средних условиях колонны определяются как отношение давлений пара  $i$ -го компонента к давлению насыщенного пара одного из компонентов смеси (эталону), выбранному произвольно [9]:

$$\alpha_i := \left( P(i, \frac{TV + TN}{2}) \right) / \left( p(tkk, \frac{TV + TN}{2}) \right). \quad (41)$$

Приближенно минимальное число теоретических тарелок в колонне определяется с помощью функции:

$$N_{\min} := \frac{\log\left(\frac{y_{lkk} \cdot x_{tkk}}{y_{tkk} \cdot x_{lkk}}\right)}{\log\left(\frac{\alpha_{lkk}}{\alpha_{tkk}}\right)}, \quad (42)$$

где  $y_{lkk}$  – мольная доля лёгкого ключевого компонента в дистилляте,  $y_{tkk}$  – мольная доля тяжёлого ключевого компонента в дистилляте,  $x_{lkk}$  – мольная доля лёгкого ключевого компонента в кубе,  $x_{tkk}$  – мольная доля тяжёлого ключевого компонента в кубе,  $\alpha_{lkk}$  – относительная летучесть лёгкого ключевого компонента,  $\alpha_{tkk}$  – относительная летучесть тяжёлого ключевого компонента.

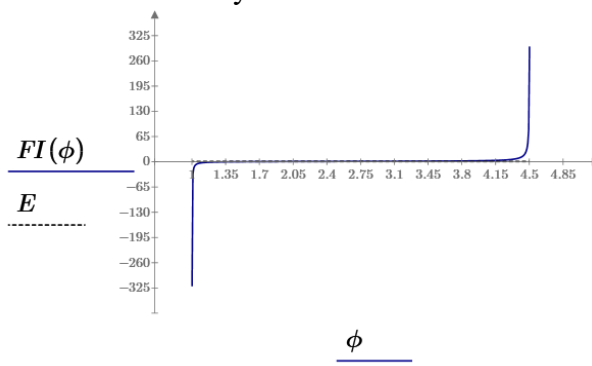


Рис.4. Определение условной относительной летучести  $\phi$ .

**Расчёт минимального и рабочего флегмового числа.** Для расчёта минимального флегмового числа в процессах многокомпонентной ректификации обычно используют систему из двух уравнений, выведенных Андервудом, из которых после несложных преобразований можно найти условную относительную летучесть и минимальное флегмовое число.

Условная относительная летучесть  $\phi$  определяется следующей зависимостью (рис.4):

$$FI(\phi) := \sum_{i=1}^n \frac{\alpha_i \cdot c_i}{\alpha_i - \phi} \quad (43)$$

$\phi = 1.001, 1.01 \dots$   $\alpha_{lkk}$  – интервал значений для искомой  $\phi$  между значениями относительных летучестей ключевых компонентов.

Далее уточняем  $\phi$  аналитическим методом. Минимальное флегмовое число определяется по формуле [8]:

$$R_{\min} := \left( \sum_{i=1}^n \frac{\alpha_i \cdot y_i}{\alpha_i - \phi} \right) - 1. \quad (44)$$

Рабочее флегмовое число можно найти по следующей эмпирической формуле [7]:

$$R := 1.35 \cdot R_{\min} + 0.35. \quad (45)$$

Расчёт теоретического числа тарелок колонны и определение места ввода питания в колонну. Методы расчёта числа тарелок могут быть подразделены на три группы: основанные на выборе ключевых пар компонентов; основанные на расчётах составов на всех тарелках колонны (потарелочные методы); смешанные методы. В работе приведён часто рекомендуемый специалистами комбинированный метод Фенске-Джиллиленда.

При определении числа теоретических тарелок колонны по методу Фенске-Джиллиленда исходят из допущения, что при соответствующем изменении флегмового числа  $R$  и числа тарелок  $N$  в ректификационной колонне можно получить продукты, удовлетворяющие заданным требованиям,

т.е. заданной чёткости разделения смеси отвечает множество пар чисел  $N$  и  $R$ . Имеется большое количество эмпирических корреляционных соотношений, связывающих между собой числа теоретических тарелок и флегмовые число. Как показала практика, наибольшую точность расчётов даёт следующее соотношение:

$$Y := 1 - \exp((1 + 54.4X)(X - 1) / ((11 + 117.2X)\sqrt{X})) \quad (46)$$

где  $X = (R - R_{\min}) / (R + 1)$ ,  $Y = (N - N_{\min}) / (N + 1)$ .

Находим число тарелок  $N$  графическим методом (рис.5), используя следующую функцию:

$$NK(N) := \frac{N - N_{\min}}{N + 1} - Y, \quad (47)$$

где  $N$  – диапазон поиска (1..30, например).

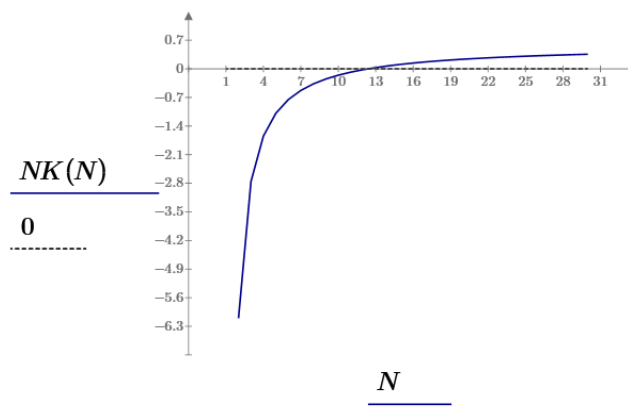


Рис.5. Определение количества тарелок колонны.

Далее уточняем количество тарелок  $N$  аналитическим методом.

Один из недостатков метода Фенске-Джиллиленда состоит в том, что он не позволяет определять место ввода исходной смеси в колонну. Для определения ступени, на которую следует подавать питание, можно использовать соотношение:

$$s := \left[ \frac{W}{D} \cdot \left( \frac{c_{ikk}}{c_{lkk}} \right) \cdot \left( \frac{x_{ikk}}{y_{ikk}} \right)^2 \right]^{0.206}, \quad (48)$$

где  $s = N_{yk} / (N_{uc} - 1)$ ,  $N_{yk}$  и  $N_{uc}$  – число теоретических ступеней соответственно в укрепляющей и исчерпывающей частях колонны (ступень питания отнесена к исчерпывающей части).

Число тарелок верхней части колонны можно найти из следующего соотношения:

$$N1 := \frac{N + s}{s + 1} \quad (49)$$

Число тарелок нижней части колонны определяется по формуле:

$$N2 := N - N1. \quad (50)$$

Для определения рабочего числа тарелок с учётом КПД тарелки (например, для колпачковой тарелки примем КПД = 0.6) используются соотношения:

$$N1 := \frac{N1}{0.6} \quad \text{или} \quad N2 := \frac{N2}{0.6} \quad (51), (52)$$

Общее число рабочих тарелок колонны находится по соотношению:

$$N := N1 + N2. \quad (53)$$

Полученные рабочие количества тарелок необходимо использовать для итерационного перерасчёта, начиная с давлений по колонне до тех пор, пока заданное количество тарелок не совпадёт с расчётным.

**Расчёт теплового баланса.** Составляется матрица констант уравнения для расчёта теплоёмкостей  $KC_p$  ( $n \times 5$ ) ( $n$  – число компонентов, 5 – количество констант уравнения (A, B, C, D, E) теплоёмкостей жидкости  $C_p = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$ ), а также матрица констант для расчёта теплот парообразования  $K_r$  (размерность  $n \times 4$ ) ( $n$  – число компонентов, 4 – количество констант (A, B, C, D) уравнения  $r = A \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{B+C \cdot \frac{T}{T_c} + D \cdot \left(\frac{T}{T_c}\right)^2}$ , где  $T_c$  – критическая температура (К)), и вектор критических температур  $T_c$  (в градусах по Кельвину) размерностью  $n$ . Значения коэффициентов берутся из справочника (теплоёмкости жидкости и теплоты парообразования).

Расчёт теплоёмкости жидкости при температуре  $T$ (К), Дж/(кмоль·К) вычисляется с помощью следующей функции:

$$C_p(i, T) := KC_{p,i,1} + KC_{p,i,2} \cdot T + KC_{p,i,3} \cdot T^2 + KC_{p,i,4} \cdot T^3 + KC_{p,i,5} \cdot T^4, \quad (54)$$

где  $KC_{p,i,1}, \dots, KC_{p,i,5}$  (при  $i=1..n$ ) – переменные для хранения констант уравнений теплоёмкостей жидкости (уже заданы с помощью массива  $KC_p$ ),  $T$  – переменная, для хранения значения температуры, при которой вычислялось давление насыщенного пара вещества.

Расчёт теплоты парообразования (Дж/кмоль) при температуре  $T$ (К) осуществляется с помощью следующей функции:

$$r(i, T) := Kr_{i,1} \left(1 - \frac{T}{T_{c,i}}\right) \quad (55)$$

Здесь:  $Kr_{i,1}, \dots, Kr_{i,4}$  (при  $i=1..n$ ) – переменные для хранения констант уравнений теплоты парообразования (уже заданы с помощью матрицы  $K_r$ ),  $T_{c,i}$  – переменная, хранящая значение критической температуры для  $i$ -го компонента,  $T$  – переменная, для хранения значения температуры, при которой вычислялось давление насыщенного пара вещества.

Теплоёмкость исходного сырья при температуре  $TF$  (Дж/(кмоль·К)) рассчитывается по функции:

$$C_p F := \sum_{i=1}^n (C_p(i, TF) \cdot c_i). \quad (56)$$

Теплоёмкость дистиллята при температуре  $TK$  (Дж/(кмоль·К)) рассчитывается при помощи функции:

$$C_p D := \sum_{i=1}^n (C_p(i, TK) \cdot y_i). \quad (57)$$

Теплоёмкость дистиллята при температуре  $TV$  (Дж/(кмоль·К)) рассчитывается при помощи функции:

$$C_p P := \sum_{i=1}^n (C_p(i, TV) \cdot y_i). \quad (58)$$

Теплоёмкость кубового остатка при температуре  $TN$  (Дж/(кмоль·К)) рассчитывается с помощью функции:

$$C_p W := \sum_{i=1}^n (C_p(i, TN) \cdot x_i). \quad (59)$$

Теплоту конденсации паров дистиллята при температуре  $TK$  (Дж/(кмоль·К)) определим, используя функцию:

$$rD := \sum_{i=1}^n (r(i, TK) \cdot y_i). \quad (60)$$

Теплота парообразования паров дистиллята при температуре  $TV$  (Дж/(кмоль·К)) рассчитывается по функции:

$$rP := \sum_{i=1}^n (r(i, TV) y_i). \quad (61)$$

Теплота парообразования питания при температуре  $TF$  (Дж/(кмоль·К)) определяется следующим образом:

$$rF := \sum_{i=1}^n (r(i, FN) c_i). \quad (62)$$

Теплота парообразования кубового остатка при температуре  $TN$  (Дж/(кмоль·К)) находится из соотношения:

$$rW := \sum_{i=1}^n (r(i, TN) x_i). \quad (63)$$

Энтальпия паров дистиллята выходящих сверху колонны при температуре  $TV$  (Дж/(кмоль·К)) находится по следующей формуле:

$$hP := C_p P \cdot (TV - 273) + rP. \quad (64)$$

Энтальпия питания с учётом фазового состояния при температуре  $TF$  (Дж/(кмоль·К)) определяется по формуле:

$$hF := C_p F \cdot (TF - 273) + rF \cdot E. \quad (65)$$

Энтальпия флегмы при температуре  $TK$  (Дж/(кмоль·К)) находится из соотношения:

$$hf := C_p f \cdot (TK - 273). \quad (66)$$

Энтальпию кубового остатка при температуре  $TN$  (Дж/(кмоль·К)) определим с помощью функции:

$$hW := C_p W \cdot (TN - 273). \quad (67)$$

Приход теплоты (Вт) с флегмой рассчитывается так:

$$Qf := \frac{D \cdot R \cdot hf}{3600}. \quad (68)$$

Приход теплоты (Вт) с питанием рассчитывается по формуле:

$$QF := \frac{F \cdot hF}{3600}. \quad (69)$$

Расход теплоты (Вт) с кубовым остатком определяется по формуле:

$$QW := \frac{W \cdot hW}{3600}. \quad (70)$$

Тепловая нагрузка (Вт) на кипятильник колонны, с учётом потерь тепла (принимаем 5%) подсчитывается с использованием функции:

$$Q_{kip} := (QP + QW - Qf - QF) \cdot 1.05. \quad (71)$$

Потери тепла (Вт) в окружающую среду, 5% от  $Q_{kip}$  определяются так:

$$Q_p := Q_{kip} \cdot 0.05. \quad (72)$$

Тепловая нагрузка (Вт) на конденсатор колонны определяется из следующего соотношения:

$$Q_{kon} := \frac{D(R+1) \cdot rD}{3600}. \quad (73)$$

Расход хладагента в конденсаторе колонны (в кг/с) находится по формуле:

$$G_{ha} := \frac{Q_{kon}}{r_{xl}}, \quad (74)$$

где  $r_{xl}$  - удельная теплота парообразования хладагента (в кДж/кг).

Расход теплоагента в кипятильнике колонны (в кг/с) рассчитывается, исходя из следующего соотношения:

$$G_{ta} := \frac{Q_{kip}}{r_{менл}}, \quad (75)$$

где  $r_{менл}$  - удельная теплота парообразования теплоагента (в кДж/кг).

Таким образом, в работе разработана методика расчета стационарных режимов работы ректификационных колонн на MathCAD Prime 3.0., базирующаяся на решении уравнений материального и теплового балансов, фазового равновесия в системах «жидкость-пар» и гидродинамической обстановки на тарелке ректификационной колонны. Предлагаемая методика предусматривает расчет давления в колонне, основанный на предварительном определении температуры полной конденсации паров дистиллята, сложность которого обусловлена нелинейным характером зависимости констант равновесия от температуры. Рассчитаны минимальное и рабочее флегмовое число в процессах многокомпонентной ректификации. Произведен расчёт теоретического числа тарелок колонны и определено положение тарелки питания.

#### Список литературы:

1. D.P.Muhitdinov, "Povy'shenie e`ffektivnosti processov rektifikacii mnogokomponentny'h smesey" [Improving the efficiency of rectification processes for multicomponent mixtures], Diss. dok. tehn. nauk, Tashkent, 2012. (in Russian)
2. N.R.YUsupbekov, D.P.Muhitdinov, SH.M.Gulyamov, "Osnovy' processov razdeleniya mnogokomponentny'h smesey" [Basics of separation processes for multicomponent mixtures], monografiya, Tashkent: «Universitet», 2017, 372 p. (in Russian)
3. V.V.Kafarov, M.B.Glebov, "Matematicheskoe modelirovanie osnovny'h processov himicheskikh proizvodstv" [Mathematical modeling of the main processes of chemical production], Moskva: Vy'sshaya shkola, 1991, 400 p. (in Russian)
4. D.P.Muhitdinov, E'.B.Kadirov, D.YU.Abdunazarova, "Razrabotka lineyny'h modeley dinamicheskikh ob`ektov upravleniya" [Development of linear models of dynamic control objects], Nauchno-tehnicheskij jurnal «Razvitie nauki i tehnologii», no. 1, pp. 135-140, 2018. (in Russian).
5. V.P.D'yakov, "MathCAD 2000: Uchebny'y kurs" [MathCAD 2000: training course], Izdatel'stvo Piter, 2000, 596 p. (in Russian).
6. E'.B.Kadirov, D.P.Muhitdinov, "Vy'chisleniya skorostey potoka jidkosti i perepada davleniya" [Subtraction of fluid flow rates and differential pressure], Nauchno-prakticheskij jurnal «Sovremenny'e materialy', tehnika i tehnologii». -YUZGU, no. 5(8), pp. 84-92, 2016.(in Russian).
7. Skogestad, S: "Dynamics and Control of Distillation Columns -A Critical Survey," 3rd IFAC Symp. on Dynamics and Control of Chemical Reactors, Distillation Columns, and Batch Processes, April 26-29, College Park, MD, USA, 1992.
8. Retzbach, B: "Mathematische Modelle von Destillationskolonnen zur Synthese von Regelungskonzepten," Fortschritt-BerichteVDI, Reihe 8: Mess-, Steuerungs- und Regelungstechnik, Nr. 126, VDI Verlag, 1986
9. A.G.Kasatkin "Osnovny'e processy' i apparaty' himicheskoy tehnologii. Uchebnik dlya vuzov. 10-e izd" [Basic processes and devices of chemical technology. Textbook for universities. 10th ed], Moskva: Al'yans, 2004, 753 p. (in Russian)

Мухитдинов Джалолиддин Пахритдинович – доктор технических наук, профессор кафедры «Автоматизация производственных процессов» ТГТУ, Тел.: (+99894)604-23-80 (м.);  
 Кадиров Ёркин Баходирович – старший преподаватель кафедры «Автоматизация и управление» НГПИ,  
 Тел.: (+99891)338-29-22 (м.), E-mail: [navdki@mail.ru](mailto:navdki@mail.ru).