

*Шейкус А.Р., Тришкін В.Я., Левчук І.Л.*

## МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ БАГАТОКОМПОНЕНТНОЇ РЕКТИФІКАЦІЇ З ВРАХУВАННЯМ РУХЛИВИХ КЕРУЮЧИХ ВПЛИВІВ

ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет», м. Дніпро

В роботі наведено математичну модель окремого контактного пристрою ректифікаційної колони, що дозволяє досліджувати ефективність рухливих керуючих впливів при управлінні статичними режимами процесів багатоконпонентної ректифікації. Розроблена математична модель містить рівняння загального і покомпонентного матеріальних балансів, рівняння теплового балансу і алгоритми розрахунку умов фазової рівноваги. Зміни точки нанесення впливу – переключення або перерозподіл потоків живлення або флегми – враховуються в моделі додатковою незалежною змінною. З метою забезпечення придатності моделі для досліджень неперервних рухливих керуючих впливів додатково введено коефіцієнт перерозподілу, що показує, яка частина від загального потоку сировини подається на нижню тарілку живлення. Витрати і температури потоків живлення обрано в якості незалежних змінних для розрахунку процесу, завдяки чому враховується інтенсивність рухливих впливів. Теоретично обґрунтовано якісні початкові наближення шуканих величин при розрахунку контактної пристрою колони знизу вгору, які одержуються виходячи із умови рівності ентальпій рідинного потоку, що надходить і залишає тарілку. Вирішення системи нелінійних рівнянь полягає в забезпеченні збіжності балансових залежностей, для чого обрано метод інтерполяції. Доведено, що застосування даного методу дозволяє знайти вирішення з необхідною точністю після першої ітерації. Розроблено алгоритм розрахунку контактної пристрою зверху вниз, що включає в себе два ітераційні цикли. Зовнішній цикл призначений для знаходження величини парового потоку, що надходить на тарілку, шляхом забезпечення збіжності теплового балансу; внутрішній цикл – для спільного розрахунку матеріального балансу і умов парорідинної рівноваги. Проведено дослідження ректифікаційних колон для поділу бінарної суміші метанол-вода і багатоконпонентної суміші – продуктів синтезу метилтретбутилового ефіру – із застосуванням розробленого алгоритмічного забезпечення. Доведено досягнення високої точності розрахунків мінімальним числом ітерацій. При цьому число компонентів в живленні суттєво не впливає на точність і швидкодію розроблених алгоритмів.

**Ключові слова:** математична модель, процес багатоконпонентної ректифікації, рухливе керування.

### *Постановка проблеми*

Характерною особливістю такого технологічного об'єкта як ректифікаційна колона є багатовимірність, внутрішній взаємозв'язок між параметрами, їх розподіленість в просторі апарата і в часі, наявність значного числа збурень. Управління таким об'єктом необхідно здійснювати з урахуванням наведених особливостей і з застосуванням інноваційних систем керування, так як традиційні методи не задовольняють високим вимогам, що відбуваються до якості і со-

бівартості одержуваних продуктів.

У роботах [1,2] розглянуто теоретичні основи і принципи побудови нового класу систем управління розподіленими об'єктами – з використанням рухливих керуючих впливів. У ролі таких впливів можуть розглядатися окремо, попарно або в сукупності інтенсивність, форма і закон руху в просторі джерел речовини та енергії. Поява нового ступеня свободи – можливості вибору закону руху матеріального або енергетичного джерела – дозволяє здійснювати пере-

ведення розподіленого об'єкта в стани, що не досяжні в класі нерушливих керуючих впливів.

В системах управління процесами ректифікації в якості рухливих керуючих впливів можуть використовуватися зміни точки введення сировини, зміни співвідношення витрат сировини або флегми при їх двопоточному введенні в колону, а також зміни витрат, складів і ентальпій названих потоків.

Доцільність застосування дискретних розподілених керуючих впливів, які полягають у зміні номера тарілки живлення, обґрунтовано в [3]. Спосіб управління ректифікаційної колоною шляхом перерозподілу потоку сировини між тарілками живлення присвячено [4].

Проте при цьому розглядався найпростіший процес бінарної ректифікації, а огляд діючих виробництв України показав, що суміші, які подаються на поділ і складаються з продуктів хімічного синтезу, переважно багатоконпонентні. У зв'язку з цим, актуальною науковою задачею залишається розробка систем автоматичного керування технологічними процесами багатоконпонентної ректифікації з використанням рухливих керуючих впливів, які носять дискретний або неперервний в просторовій області об'єкта характер.

#### *Аналіз досліджень і публікацій*

Перш ніж здійснити вибір, розрахунок, синтез систем автоматичного керування, необхідно виявити основні властивості і залежності самого об'єкта – ректифікаційної колони. Статичні характеристики, що відображають взаємозв'язки параметрів і змінних процесу в усталеному режимі, дозволяють досліджувати можливість колони, обрати структуру систем автоматичного керування, оцінити доцільність і ефективність розроблених способів управління [5].

У зв'язку зі складністю проведення експериментів на діючому обладнанні, дослідження особливостей управління процесами ректифікації з рухливими керуючими впливами вимагає, в першу чергу, створення математичної моделі, адекватної об'єкту при зміні його параметрів в широких межах, і моделюючих програм. Застосування ж існуючих систем моделювання хіміко-технологічних процесів, таких як Aspen HYSYS, Aspen Plus, CHEMCAD і ін., викликає складнощі. Причинами цього є великі витрати на придбання та підтримку програм, обмеження набору апаратів типовими або ідеалізованими моделями, неможливість використання авторських розробок [6].

У літературі наведено велику кількість робіт,

які присвячені розрахунку робочих режимів ректифікаційних установок, при цьому всі підходи можливо умовно розділити на наближені і точні. У першому випадку приймаються досить грубі припущення і залежності емпіричного характеру [7]; до таких методів належать всі розрахунки процесу, за винятком потарілчастих. Основу точних методів становить математичний опис і розрахунок окремого контактної пристрою колони, під яким маються на увазі також куб і дефлегматор.

В [8] наведено математичну модель контактної пристрою тарілчастої ректифікаційної колони, призначеної для поділу багатоконпонентних сумішей. Дану модель без істотних змін успішно використано для вирішення цілої низки завдань, пов'язаних з моделюванням установок [9–11]. Очевидно, що для дослідження рухливих керуючих впливів дане математичне забезпечення необхідно належним чином перетворити і доповнити.

Математична модель контактної пристрою містить рівняння загального і покомпонентного матеріальних балансів, рівняння теплового балансу, алгоритми розрахунку умов фазової рівноваги і розрахунку коефіцієнта ефективності масопередачі на тарілці. Система рівнянь нелінійна та її вирішення можливе лише ітераційними методами [12].

#### *Формулювання цілей статті (постановка завдань)*

Мета роботи: розробка математичної моделі, вибір чисельних методів і побудова алгоритмів розрахунків окремого контактної пристрою ректифікаційної колони для поділу багатоконпонентних сумішей з врахуванням рухливих керуючих впливів.

Для досягнення мети вирішено наступні завдання:

- розробка математичної моделі контактної пристрою ректифікаційної колони з врахуванням рухливих керуючих впливів;
- вибір вихідних даних і незалежних змінних, чисельних методів розв'язання одержаної системи нелінійних рівнянь;
- розробка алгоритмів розрахунку контактної пристрою в обох напрямках, їх графічна інтерпретація.

#### *Виклад основного матеріалу дослідження*

Точні (потарілчасті) методи розрахунку ректифікаційних колон дозволяють відмовитися від істотних припущень, які спотворюють результати досліджень, і враховувати розподіленість параметрів, що характеризують роботу установ-

ки. Однак, уникнути спрощень, які властиві математичній моделі, прийнятій за основу, або які значно знижують розмірність і трудомісткість розрахунків, неможливо. До них належать такі положення:

- рідина в колоні знаходиться за температури кипіння, а пар – конденсації;
- колона працює в адіабатичних умовах;
- на контактних пристроях колони в рідинній фазі приймається гідродинамічна модель повного змішування, в паровий – повного витіснення.

На рис. 1 схематично відображені основні матеріальні і енергетичні (теплові) потоки, що надходять і відводяться з контактного пристрою ректифікаційної колони.

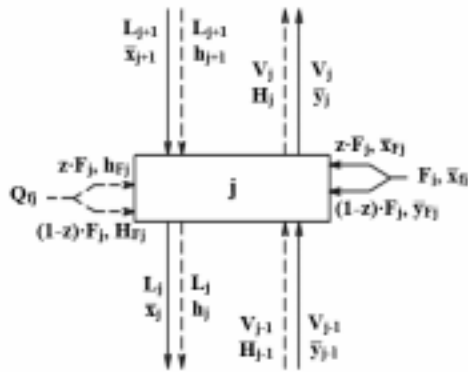


Рис. 1. Схема матеріальних та енергетичних потоків контактної пристрою ректифікаційної колони

З метою моделювання рухливих керуючих впливів на процес модель, що розробляється, повинна передбачати подачу живлення на будь-яку тарілку. Якщо на розглянуту тарілку сировина не подається, то  $F_j=0$ , схема і розрахунки значно спрощуються. Від’ємні значення  $F_j$  відображають відбір проміжного продукту з тарілки.

Живлення, що подається в колону, може мати різні фазові стани: недогріта рідина, рідина, що кипить, парорідинна суміш (частка рідини в такій суміші позначена як  $z_j$ ), пара, що конденсується, перегріта пара. Парорідинне живлення, що подається на тарілку, в загальному випадку можна розбити на рідинний (його витрата складає  $z_j \cdot F_j$ , склад –  $x_{F,j}$ ) і паровий ( $(1-z_j) \cdot F_j$ ,  $y_{F,j}$ ) потоки. Кожен з цих потоків має свою концентрацію (виконується умова фазової рівноваги для рідини і пари) і ентальпію ( $h_{F,j}$  та  $H_{F,j}$  відповідно).

Загальний матеріальний баланс контактної

пристрою:

$$L_j + V_j = L_{j+1} + V_{j-1} + F_j. \tag{1}$$

Сума мольних концентрацій в будь-якому матеріальному потоці дорівнює одиниці:

$$\sum_{i=1}^n x_{j,i} = \sum_{i=1}^n y_{j,i} = 1. \tag{2}$$

Це означає, що склад будь-якого потоку визначається  $n-1$  концентраціями компонентів, концентрація останнього дорівнюватиме різниці між одиницею та їх сумою:

$$x_{j,n} = 1 - \sum_{i=1}^{n-1} x_{j,i};$$

$$y_{j,n} = 1 - \sum_{i=1}^{n-1} y_{j,i}. \tag{3}$$

Рівняння покомпонентного матеріального балансу:

$$L_j \cdot \bar{x}_j + V_j \cdot \bar{y}_j = L_{j+1} \cdot \bar{x}_{j+1} + V_{j-1} \cdot \bar{y}_{j-1} + F_j \cdot \bar{x}_{f,j}. \tag{4}$$

Система (4) складається з  $n-1$  рівнянь, так як їх збіжність забезпечить відповідність матеріального балансу і за  $n$ -им компонентом.

Тепломісткість (ентальпія) потоків залежить від кількісного і якісного складу, температури і тиску. Так як прийнято припущення, що рідина в колоні знаходиться за температури кипіння, а пара – температури конденсації, то температури потоків в свою чергу також є функціями складів і тиску, а ентальпії визначаються відповідно до виразів:

$$h_{j+1} = f(\bar{x}_{j+1}, P_j); \tag{5}$$

$$H_j = f(\bar{y}_j, P_j); \tag{6}$$

$$h_{F,j} = f(\bar{x}_{F,j}, P_{f,j}, t_{f,j}); \tag{7}$$

$$H_{F,j} = f(\bar{y}_{F,j}, P_{f,j}, t_{f,j}). \tag{8}$$

Тепло, що вноситься в колону живленням:

$$Q_{f,j} = F_j \cdot (z_j \cdot h_{F,j} + (1-z_j) \cdot H_{F,j}). \tag{9}$$

В усталеному режимі температура в кубі колони і температури потоків постійні. Тепловий баланс:

$$L_j \cdot h_j + V_j \cdot H_j = L_{j+1} \cdot h_{j+1} + V_{j+1} \cdot H_{j+1} + Q_{f,j}. \quad (10)$$

Склад парового потоку, що знаходиться в рівновазі з рідинною фазою, є функцією складу і температури цієї рідини, а також тиску на тарілці:

$$\bar{y}_j^* = f(\bar{x}_j, P_j). \quad (11)$$

Повна рівновага між паром та рідиною на контактних пристроях колони не досягається. Дана обставина враховується коефіцієнтом корисної дії  $\eta$ , який в загальному випадку розраховується з врахуванням кінетики масопередачі і гідродинаміки потоків на тарілці. У зв'язку з високою складністю таких розрахунків, а також недостовірністю самих методів, заснованих на теорії подібності дифузійних процесів, даний коефіцієнт пропонується приймати у ролі налаштувального для отриманої моделі. Реальна концентрація  $i$ -ого компонента в паровій фазі, що залишає куб колони:

$$y_{j,i} = y_{j-1,i} + (y_{j,i}^* - y_{j-1,i}) \cdot \eta_{j,i}. \quad (12)$$

Рівняння (1)–(12) складають повний математичний опис контактної пристрою ректифікаційної колони. Рухливі керуючі впливи в даній моделі враховуються наступним чином.

Моделювання переключення подачі потоку сировини з однієї тарілки на іншу можливо виходячи з допустимості визначення в якості тарілки живлення будь-якої з усіх тарілок колони і навпаки.

Перерозподіл потоку живлення між двома тарілками пропонується враховувати шляхом введення в загальну модель ректифікаційної колони коефіцієнта перерозподілу  $q$ . Цей параметр показує, яка частина від загального потоку живлення подається на нижню тарілку. Таким чином, коефіцієнт  $q$  може приймати будь-які значення між 0 (весь потік живлення подається на верхню тарілку) і 1 (на нижню), а зміна цього значення дозволяє досліджувати робочі режими колони ректифікації при нанесенні неперервного рухливого керуючого впливу.

В цьому випадку, якщо витрата загального потоку живлення становить  $F$  кмоль/год, то витрата першого (нижнього) потоку живлення:

$$F_1 = q \cdot F, \quad (13)$$

а верхнього:

$$F_2 = F - F_1 = (1 - q) \cdot F. \quad (14)$$

Рухливі керуючі впливи, які полягають у перерозподілі флегми, можливо моделювати аналогічно перерозподілу живлення з врахуванням того, що замість сировини на відповідну тарілку буде надходити флегма. Витрата такого потоку  $F_j$  визначається коефіцієнтом  $u$ :

$$F_3 = u \cdot F = u \cdot (V_N - D). \quad (15)$$

Дослідження впливу на статичні характеристики колони інтенсивностей рухливих керуючих впливів – змін витрат і ентальпій потоків живлення або флегми – полягає в прийнятті даних параметрів в якості незалежних змінних і розрахунку ректифікаційної колони при їх різних значеннях.

Вирішення отриманої системи нелінійних рівнянь можливо здійснити тільки із застосуванням методів послідовних наближень (ітерацій). Для їх реалізації попередньо необхідно:

а) здійснити вибір незалежних змінних і початкових даних для розрахунку;

б) визначити початкові наближення змінних, що ітераційно розраховуються;

в) обрати чисельні методи вирішення і критерій збіжності розрахунків, які дозволяють визначити нові, уточнені значення величин, які розраховуються, напрям і момент припинення розрахунків.

Здійснити вибір незалежних змінних і початкових даних для розрахунку контактної пристрою ректифікаційної колони можливо тільки після вирішення аналогічної задачі для всієї ректифікаційної установки. Для дослідження рухливих керуючих впливів, які полягають в переміщенні або перерозподілі потоку живлення, або флегми в просторі апарата, найбільш придатний метод «від тарілки до тарілки» (метод Льюїса і Матісона). В цьому випадку незалежними змінними є склади продуктів поділу.

Однонаправлений потарілчастий розрахунок ректифікаційної колони методом «від тарілки до тарілки» часто призводить до появи різних аномалій, таких як від'ємні концентрації окремих компонентів, зменшення концентрацій легких компонентів від низу до вершу по колоні та ін. Основною причиною цього є недостатня точність у визначенні початкових наближень концентрацій компонентів в тому продукті, від якого ведеться розрахунок. Щоб уникнути таких ситуацій застосовують двонаправлений розрахунок колони – до тарілки живлення. У цьому випадку розрахунок контактної пристрою колони необхідно здійснювати знизу вгору для

вичерпної частини колони і зверху вниз для зміцнюючої.

Основними контрольованими збуреннями, що діють на всю колону, є витрата, склад і температура потоків живлення:  $F_j, x_{f,j}, t_{f,j}$ . Також вимірюються профіль тиску ректифікаційної колони  $P$  і тиск в лінії подачі живлення  $P_{f,j}$ .

При розрахунку контактної пристрою від низу до верху відповідно до обраного методу «від тарілки до тарілки» початковими і відомими даними для будь-якого контактної пристрою є витрати, концентрації, ентальпії рідинної і парової фаз, знайдені при розрахунках попередньої тарілки:  $L_j, V_{j-1}, x_j, y_{j-1}, h_j, H_{j-1}$ . Завданням розрахунку  $j$ -ого контактної пристрою є визначення характеристик потоків, що надходять (парова фаза) і залишають (рідинна) контактний пристрій, розташований вище:  $V_j, L_{j+1}, y_j, x_{j+1}, H_j, h_{j+1}$ . При розрахунку зверху вниз завдання дзеркально протилежне.

Так як відомі склад рідинної фази, що знаходиться на тарілці, і тиск, то на підставі алгоритму фазової рівноваги розраховується склад рівноважної парової фази (11). За рівнянням (12) з урахуванням ККД тарілки визначаються реальні концентрації компонентів в парі, що залишає тарілку. Розрахований таким чином склад дозволяє визначити кількість тепла (6), що уноситься паровим потоком з тарілки. Далі, якщо на даний контактний пристрій подається сировина, визначається кількість тепла, внесеного на тарілку живленням (7)–(9).

Шляхом підстановки (1) в (4) і (10) можливо отримати систему рівнянь для розрахунку складу і ентальпії рідини, що надходить на розглянуту тарілку:

$$\begin{cases} \bar{x}_{j+1} = \frac{L_j \cdot \bar{x}_j + V_j \cdot \bar{y}_j - V_{j-1} \cdot \bar{y}_{j-1} - F_j \cdot \bar{x}_{f,j}}{L_j + V_j - V_{j-1} - F_j}, \\ h_{j+1} = f(\bar{x}_{j+1}, P_j); \\ h_{j+1} = \frac{L_j \cdot h_j + V_j \cdot H_j - V_{j-1} \cdot H_{j-1} - Q_{f,j}}{L_j + V_j - V_{j-1} - F_j}. \end{cases} \quad (16)$$

Система (16) складається з  $n+1$  рівнянь і містить  $n+1$  невідому:  $V_j, x_{j+1}$  і  $h_{j+1}$ . В зв'язку з тим, що залежність ентальпії потоку від його концентрації задана неявно, то вирішення системи можливо тільки ітераційним способом.

Концентрації компонентів в рідинній фазі, яка надходить на тарілку, згідно з матеріальним

балансом є функціями шуканого парового потоку, який тарілку залишає. Для будь-якого значення  $V_j$  виконується залежність (2):

$$\sum_{i=1}^n x_{j+1,i} = \sum_{i=1}^n \left( \frac{L_j \cdot x_{j,i} + V_j \cdot y_{j,i} - V_{j-1} \cdot y_{j-1,i} - F_j \cdot x_{f,j,i}}{L_j + V_j - V_{j-1} - F_j} \right) = 1, \quad (17)$$

тому рівняння покомпонентного матеріального балансу доповнюються тепловим. Тепловий баланс відображає залежність ентальпії рідинної фази  $h_{j+1}$  також від витрати пари  $V_j$ . Вирішення визначається спільною відповідністю балансових рівнянь, для чого знаходиться ентальпія рідинної фази, склад якої розраховується з матеріального балансу.

В околицях шуканої точки балансові залежності носять практично лінійний характер. В цьому випадку, якщо початкове наближення  $V_j$  обрано з високою точністю, то застосування таких методів вирішення систем нелінійних рівнянь, як метод Ньютона або інтерполяції, дозволяє знайти відповідь після єдиної ітерації.

Завдання можна сформулювати наступним чином: необхідно знайти таке значення  $V_j$ , при якому якась функція  $f(V_j)=0$ . В якості такої функції виступає нев'язка теплового балансу колони:

$$f(V_j) = \left( \frac{Q_{f,j} - F_j \cdot h_{j+1} + V_{j-1} \cdot (H_{j-1} - h_{j+1}) + L_j \cdot (h_{j+1} - h_j)}{H_j - h_{j+1}} \right) - V_j = 0. \quad (18)$$

В рівнянні (18) величина ентальпії  $h_{j+1}$  розраховується згідно покомпонентного матеріального балансу і алгоритму розрахунку ентальпій. У зв'язку з цим визначення похідної функції  $f(V_j)$  в загальному вигляді неможливо і найбільш зручним засобом для вирішення є метод інтерполяції. Відповідно до цього методу обирають довільні два значення  $V_j (V_j^0 \text{ і } V_j^1)$  і розраховують відповідні їм значення функції (18):  $f(V_j^0)$  і  $f(V_j^1)$ . Наступні наближення величини  $V_j$ :

$$V_j^{k+1} = \frac{V_j^{k-1} \cdot f(V_j^k) - V_j^k \cdot f(V_j^{k-1})}{f(V_j^k) - f(V_j^{k-1})}. \quad (19)$$

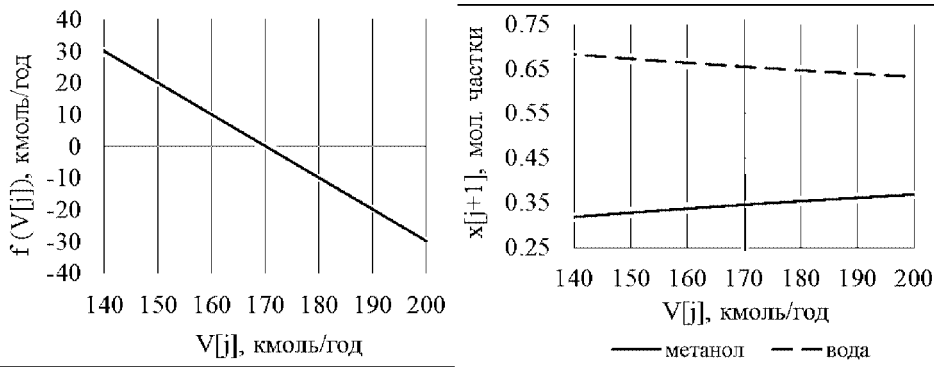


Рис. 2. Нев'язка теплового балансу і склад рідинної фази в залежності від шуканої витрати парового потоку

В якості початкового наближення шуканої величини парового потоку  $V_j$  пропонується використовувати значення, отримане за умови, що ентальпії рідинної фази, яка надходить на тарілку і залишає її, рівні ( $h_{j+1}=h_j$ ):

$$V_j^0 = \frac{Q_{f,j} - F_j \cdot h_j + V_{j-1} \cdot (H_{j-1} - h_j)}{H_j - h_j} \quad (20)$$

Абсциса другої точки  $V_j^1$  за умови лінійної залежності функції  $f(V_j)$  від  $V_j$ , може бути обрана довільно:

$$V_j^1 = V_j^0 + \Delta V_j \quad (21)$$

Якщо значення  $\Delta V_j$  прийняти рівним 1 кмоль/год, то рівняння (19) для розрахунку першого наближення  $V_j$  можливо записати у вигляді:

$$V_j^2 = V_j^0 + \frac{f(V_j^0)}{f(V_j^0) - f(V_j^1)} \cdot \Delta V_j \quad (22)$$

Ітераційний процес завершується в тому випадку, якщо невязка теплового балансу (18) дорівнює нулю з необхідною точністю:

$$\left| f(V_j) = \frac{Q_{f,j} - F_j \cdot h_{j+1} + V_{j-1} \cdot (H_{j-1} - h_{j+1}) + L_j \cdot (h_{j+1} - h_j)}{H_j - h_{j+1}} - V_j \right| \leq \epsilon \quad (23)$$

Як показали практичні дослідження, зна-

чення  $V_j^{k=1}$ , розраховане за рівнянням (22), задовольняє нерівності (23) з точністю  $\epsilon=10^{-6}$ .

Вид функції  $f(V_j)$  на прикладі довільно обраної 7-ї тарілки ректифікаційної колони для поділу суміші метанол-вода, показано на рис. 2.

На усьому обраному діапазоні дана функція дуже близька до лінійної, що пояснюється незначним впливом величини парового потоку на ентальпію рідинної фази (рис. 3), розрахованої на підставі матеріального балансу, а, значить, постійністю значення дробової частини рівняння (18). Це вказує на вдалий вибір виразу, що визначає функцію  $f(V_j)$ .

Ітераційні наближення при розрахунку системи нелінійних рівнянь (16) показані на рис. 3.

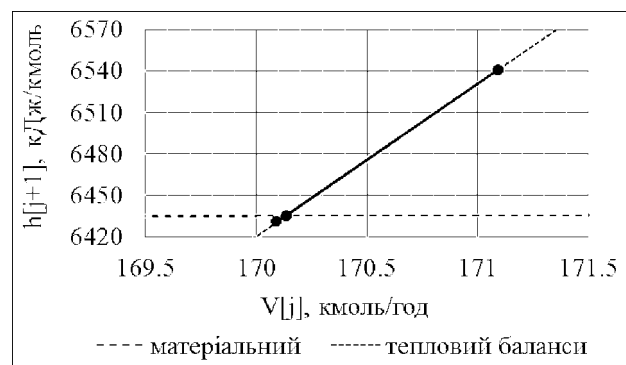


Рис. 3. Збіжність алгоритмів розрахунку контактної пристрою від низу до верху

Із рис. 3 видно, що вирішення забезпечує єдина ітерація. При побудові графіка було використано початкове наближення (20). Вирішення знаходиться в безпосередній близькості від початкової точки, однак не збігається з нею. Таким чином, припущення про постійність витрат парової і рідинної фаз по висоті ректифікаційної колони, яке широко використовується при розрахунку апаратів, є досить грубим.

Останньою дією алгоритму є розрахунок загального матеріального балансу контактної пристрою (1) і визначення останньої невідомої величини –  $L_{j+1}$ .

Зворотна задача – розрахунок контактної пристрою колони в напрямку від дефлегматора до куба – містить два ітераційні процеси (один всередині іншого), при цьому внутрішній цикл призначений для вирішення системи нелінійних рівнянь порядку  $n-1$ .

Основна складність вирішення задачі, яка на перший погляд видається дзеркальною розрахункам від низу до верху, полягає в використанні у всіх розрахунках величини ККД тарілки за паровою фазою. Провести розрахунок парорідинної рівноваги в цьому випадку можливо тільки ітераційно.

Зовнішній ітераційний цикл алгоритму призначений для знаходження величини парового потоку, що надходить на тарілку,  $V_{j-1}$  шляхом забезпечення збіжності теплового балансу (як і при розрахунках від низу до верху); в той же час внутрішній цикл проводить для кожного наближення  $V_{j-1}$  спільний розрахунок матеріального балансу та парорідинної рівноваги.

В рівнянні теплового балансу (10), здійснивши заміну величини невідомих ентальпій на значення ентальпій відомих потоків, отримаємо початкове наближення величини парового потоку:

$$V_{j-1}^0 = \frac{F_j \cdot h_j - Q_{f,j} + V_j \cdot (H_j - h_{j+1})}{H_j - h_{j+1}} \quad (24)$$

Початкові концентрації цього парового потоку, які ітераційно уточнюються у внутрішньому циклі:

$$\bar{Y}_{j-1} = \bar{Y}_j \quad (25)$$

Витрату рідини, що стікає з тарілки, з рівняння (1)  $L_j = V_{j-1} + L_{j+1} + F_j - V_j$  підставимо в рівняння (4) і отримаємо вирази для концентрацій цього потоку:

$$\bar{x}_j = \frac{V_{j-1}}{L_{j+1} + V_{j-1} - V_j + F_j} \cdot \bar{y}_{j-1} + \frac{L_{j+1} \cdot \bar{x}_{j+1} - V_j \cdot \bar{y}_j + F_j \cdot \bar{x}_{f,j}}{L_{j+1} + V_{j-1} - V_j + F_j} \quad (26)$$

Рівняння парорідинної рівноваги з враху-

ванням ККД (12) для шуканого складу пари:

$$y_{j-1,i} = \frac{y_{j,i} - \eta_{j,i} \cdot y_{j,i}^*}{1 - \eta_{j,i}} \quad (27)$$

Рівняння (27) не вирішується при значенні ККД будь-якого компонента, що дорівнює 1. Однак в цьому випадку відпадає і необхідність даних ітераційних розрахунків і для визначення складів фаз необхідно використовувати тільки алгоритми фазової рівноваги.

З використанням початкового наближення витрати  $V_{j-1}^0$  (24) і складу парового потоку  $y_{j-1}$  (25) розраховується склад рідинної фази  $x_j$  (26). За залежністю (11) знаходиться рівноважний склад парової фази  $y_j^*$ , який, при підстановці в рівняння (27), дозволяє провести уточнення концентрацій парового потоку  $y_{j-1}$ . Розрахунки у внутрішньому циклі завершуються при виконанні умови:

$$\sum_{i=1}^{n-1} \left| \frac{y_{j,i} - \eta_{j,i} \cdot y_{j,i}^*}{1 - \eta_{j,i}} - y_{j-1,i} \right| \leq (n-1) \cdot \epsilon \quad (28)$$

Після цього знаходяться ентальпії потоків. Рівняння теплового балансу тарілки дозволяє провести уточнення величини парового потоку, після чого описані операції повторюються.

Робота даного алгоритму розглядалася на прикладі ректифікаційної установки, призначеної для поділу продуктів синтезу метилтретбутилового ефіру (МТБЕ).

Для різних тарілок верхньої, зміцнюючої частини колони, яка розраховується зверху вниз, від дистилятора до контрольного перетину, побудовано графіки функцій  $f(V_{j-1})$  (рис. 4).

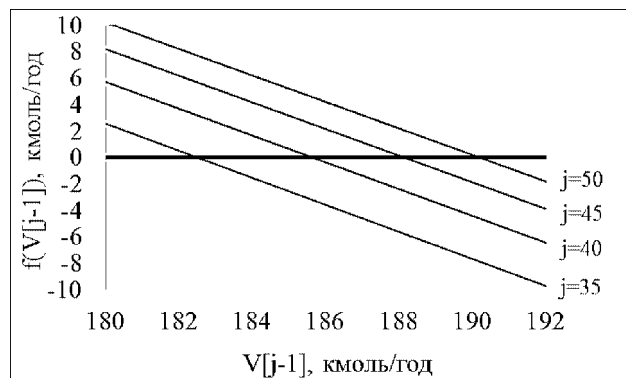


Рис. 4. Нев'язки теплових балансів при розрахунку контактних пристроїв зверху вниз

Як видно з рис. 4, дані залежності також близькі до лінійних незважаючи на збільшення кількості компонентів з 2 до 10. Це дозволяє знайти вирішення – координати точки перетину графіка функції  $f(V_{j-1})$  з віссю абсцис – після першого наближення значення  $V_{j-1}$ .

#### Висновки

У роботі розроблено нову математичну модель контактної пристрою ректифікаційної колони, що дозволяє розраховувати статичні характеристики процесу ректифікації і досліджувати вплив на режими роботи установки дискретних або неперервних рухливих керуючих впливів та враховує багатоконпонентність сумішей, що поділяються. Наводяться чисельні методи і відповідні їм алгоритми вирішення одержаної системи нелінійних рівнянь згідно з потарілчастим методом розрахунку колони як у напрямку від куба до дефлегматора, так і в зворотному напрямку.

Подальші дослідження у даному напрямку полягають в розробці моделі динаміки ректифікаційної колони, що дозволяє враховувати рухливі керуючі впливи на процес, а також в моделюванні перехідних режимів роботи колон при рухливому керуванні процесом ректифікації.

#### Умовні позначення

D – мольна витрата дистилляту, кмоль/год;  
 F – мольна витрата живлення, кмоль/год;  
 H – ентальпія парової фази, кДж/кмоль;  
 h – ентальпія рідинної фази, кДж/кмоль;  
 L – мольна витрата рідинної фази, кмоль/год;  
 n – кількість компонентів в живленні;  
 N – кількість тарілок в колоні;  
 P – тиск, МПа;  
 Q – витрата тепла, кДж/год;  
 q – коефіцієнт перерозподілу сировини між тарілками живлення;  
 t – температура, °C;  
 u – коефіцієнт перерозподілу флегми;  
 V – мольна витрата парової фази, кмоль/год;  
 x – мольна концентрація компонента в рідинній фазі;  
 y – мольна концентрація компонента в паровій фазі;  
 z – частка рідинної фази в живленні, кмоль/кмоль;  
 η – ефективність масопередачі на контактному пристрої.  
 Нижні індекси: f – параметр живлення;  
 F – параметр рідинної або парової фази живлення;  
 i – розглянутий компонент суміші;  
 j – розглянутий контактний пристрій колони;

N – останній контактний пристрій колони.

Верхні індекси: \* – рівноважний параметр;  
 0 – початкове наближення; k – номер ітерації.

#### СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. *Бутковский А.Г.* Методы управления системами с распределенными параметрами. – М.: Наука, 1975. – 568 с.
2. *Ранопорт Э.Я.* Анализ и синтез систем автоматического управления с распределенными параметрами. – М.: Высш. шк., 2005. – 292 с.
3. *Белоброва Е.В., Шейкус А.Р., Корсун В.И.* Автоматическое управление тепломассообменными процессами с подвижными распределенными регулирующими воздействиями // *Eastern-European Journal of Enterprise Technologies.* – 2014. – № 5/2 (71). – С.51-55. doi: 10.15587/1729-4061.2014.28037.
4. *Левчук И.Л., Шейкус А.Р., Тришкин В.Я.* Способ управления процессом ректификации с помощью распределенных управляющих воздействий // *Вісник НТУ «ХПІ».* Серія: Нові рішення в сучасних технологіях. – 2015. – № 14 (1123). – С.100-105.
5. *Sinnot R.K., Towler G.* *Chemical Engineering Design, SI Edition (5th Edition)* – Elsevier Butterworth-Heinemann, 2009. – 1038 p.
6. *Никитина С.Ю.* Разработка и научное обеспечение ресурсосберегающих технологий ректификационной очистки пищевого этилового спирта: Дис. ... д-ра техн. наук: 05.18.12, 05.18.01. – Воронеж, 2016. – 462 с.
7. *Петлюк Ф.Б.* Многокомпонентная ректификация. Теория и расчет. – М.: Химия, 1983. – 304 с.
8. *Кафаров В.В., Глебов М.В.* Математическое моделирование основных процессов химических производств. – М.: Высш. шк., 1991. – 400 с.
9. *Komissarov Yu.A., Dam Quang Sang* Multicomponent distillation calculations using computer simulation principles // *Theoretical Foundations of Chemical Engineering.* – 2014. – vol. 48, Issue 3. – pp.280-287. doi: 10.1134/S0040579514030087.
10. *Буряков В.Г., Ходзинский А.Н.* Разработка одного класса математических моделей ректификации многокомпонентных смесей // *Компьютерная математика.* – 2008. – № 2. – С.13-24.
11. *Ворошин А.В., Неробелов А.О., Полянский А.В.* Модель процесса ректификации в колонне с пакетной вихревой насадкой // *Сборник трудов III Всероссийской студенческой научно-технической конференции «Интенсификация тепло-массообменных процессов, промышленная безопасность и экология».* – Казань. – 2012. – С.224-228.
12. *Holland C.D.* *Fundamentals of multicomponent distillation.* – New York: McGraw-Hill Book Company, 1981. – 626 p.

Надійшла до редакції 09.04.2018



**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ РЕКТИФИКАЦИИ С УЧЕТОМ ПОДВИЖНЫХ УПРАВЛЯЮЩИХ ВОЗДЕЙСТВИЙ***Шейкус А.Р., Тришкин В.Я., Левчук И.Л.*

В работе представлена математическая модель отдельного контактного устройства ректификационной колонны, позволяющая исследовать эффективность подвижных управляющих воздействий при управлении статическими режимами процессов многокомпонентной ректификации. Разработанная математическая модель содержит уравнения общего и покомпонентного материальных балансов, уравнение теплового баланса и алгоритмы расчета условий фазового равновесия. Изменения точки нанесения воздействия – переключение или перераспределение потоков питания или флегмы – учитываются в модели дополнительной независимой переменной. С целью обеспечения применимости модели для исследований непрерывных подвижных управляющих воздействий дополнительно введен коэффициент перераспределения, показывающий, какая часть от общего потока сырья подается на нижнюю тарелку питания. Расходы и температуры потоков питания выбраны в качестве независимых переменных для расчета процесса, благодаря чему учитывается интенсивность подвижных воздействий. Теоретически обоснованы качественные начальные приближения искомых величин при расчете контактного устройства колонны снизу вверх, получаемые исходя из условия равенства энтальпий жидкого потока, который поступает и покидает тарелку. Решение системы нелинейных уравнений заключается в обеспечении сходимости балансовых зависимостей, для чего выбран метод интерполяции. Доказано, что применение данного метода позволяет найти решение с необходимой точностью после первой итерации. Разработан алгоритм расчета контактного устройства сверху вниз, включающий в себя два итерационных цикла. Внешний цикл предназначен для нахождения величины парового потока, поступающего на тарелку, путем обеспечения сходимости теплового баланса; внутренний цикл – для совместного расчета материального баланса и условий парожидкостного равновесия. Проведено исследование ректификационных колонн для разделения бинарной смеси метанол-вода и многокомпонентной смеси – продуктов синтеза метилтретбутилового эфира – с применением разработанного алгоритмического обеспечения. Доказано достижение высокой точности расчетов минимальным числом итераций. При этом число компонентов в питании существенно не влияет на точность и быстрдействие разработанных алгоритмов.

**Ключевые слова:** математическая модель, процесс многокомпонентной ректификации, подвижное управление.

**MODELING OF THE MULTICOMPONENT RECTIFICATION PROCESS CONSIDERING THE MOBILE CONTROL ACTIONS***Sheikus A.R., Trishkin V.Ya., Levchuk I.L.*

Ukrainian State University of Chemical Technology, Dnipro, Ukraine

The mathematical model of a separate rectifying column contact device is presented, which allows to investigate the effectiveness of mobile control actions when controlling static modes of multicomponent rectification processes. The developed mathematical model contains equations of general and component material balances, the heat balance equation and algorithms for calculating phase equilibrium conditions. Changes of the point of exposure – switching or redistribution of the flow or reflux – are accounted for in the model using additional independent variable. In order to ensure the applicability of the model for studies of continuous mobile control actions, a redistribution coefficient showing which part of the total feed stream is fed to the lower feeding plate, is additionally introduced. Flowrates and flow temperatures are chosen as independent variables for the calculation of the process, so that the intensity of the mobile actions is taken into account. The qualitative initial approximations of the unknown quantities are theoretically justified when calculating the column's contact device from the bottom up, obtained on the basis of the equality of the enthalpies of the liquid flow that enters and leaves the plate. The solution of the system of nonlinear equations is to ensure the convergence of the balance dependencies, for which the interpolation method is chosen. It is proved that the application of this method allows finding a solution after the first iteration. An algorithm for calculating the contact device from the top down is developed. It includes two iteration cycles. The outer cycle is designed to find the value of the steam flow entering the plate by ensuring the convergence of the heat balance; in the internal cycle the material balance and the conditions of vapor-liquid equilibrium are jointly calculated. The distillation columns for separation of a binary methanol-water mixture and a multicomponent mixture – methyl tert-butyl ether (MTBE) products – were studied using the provided algorithmic support. The achievement of high accuracy of calculations by the minimum number of iterations is proved. At the same time, the number of components in the feed does not significantly affect the accuracy and speed of the developed algorithms.

**Keywords:** mathematical model, multicomponent rectification process, mobile control.

## REFERENCES

1. Butkovskiy A.G. *Metody upravleniya sistemami s raspredelennymi parametrami* [Control methods for distributed parameter systems], Nauka, Moskva, 1975, 568 p. (*in Russian*).
2. Rapoport E.Ya. *Analiz i sintez sistem avtomaticheskogo upravleniya s raspredelennymi parametrami* [Analysis and synthesis of automatic control systems with distributed parameters], Vysshaya shkola, Moskva, 2005. 292 p. (*in Russian*).
3. Belobrova E.V., Sheykus A.R., Korsun V.I. *Avtomaticheskoe upravlenie teplomassoobmennymi protsessami s podvizhnymi raspredelennymi reguliruyushchimi vozdeystviyami* [Automatic control of heat and mass exchange processes with mobile distributed control actions], *Eastern-European Journal of Enterprise Technologies*, 2014, vol. 5, no. 2 (71), pp.51-55. doi: 10.15587/1729-4061.2014.28037. (*in Russian*).
4. Levchuk I.L., Sheykus A.R., Trishkin V.Ya. *Sposob upravleniya protsessom rektifikatsii s pomoshch'yu raspredelennykh upravlyayushchikh vozdeystviy* [Control method of rectification process using mobile control actions], *Visnyk Nacional'nogo tekhnicheskogo universytetu «HPI»* [Bulletin of the National Technical University «KhPI»], 2015, no. 14 (1123), pp.100-105. (*in Russian*).
5. Sinnott R. K., Towler G. *Chemical Engineering Design*. Elsevier Butterworth-Heinemann, 2009. 1038 p.
6. Nikitina S. Yu. *Razrabotka i nauchnoe obespechenie resursosberegayushchikh tekhnologiy rektifikatsionnoy ochistki pishchevogo etilovogo spirta* [Development and scientific provision of resource-saving technologies for the rectification of food ethanol], Diss. ... Dr. of Tech. Sc.: 05.18.12, 05.18.01, Voronezh, 2016. 462 p. (*in Russian*).
7. Petlyuk F.B., Serafimov L.A. *Mnogokomponentnaya rektifikatsiya. Teoriya i raschet* [Multicomponent rectification. Theory and calculation], Khimiya, Moskva, 1983, 304 p. (*in Russian*).
8. Kafarov V.V., Glebov M.B. *Matematicheskoe modelirovanie osnovnykh protsessov khimicheskikh proizvodstv* [Mathematical modeling of the basic processes of chemical productions], Vysshaya shkola, Moskva, 1991. 400 p. (*in Russian*).
9. Komissarov Yu.A., Dam Quang Sang *Multicomponent distillation calculations using computer simulation principles, Theoretical Foundations of Chemical Engineering*, 2014, vol. 48, no. 3, pp.280-287. doi: 10.1134/S0040579514030087. (*in Russian*).
10. Buryakov V.G., Khodzinskiy A.N. *Razrabotka odnogo klassa matematicheskikh modeley rektifikatsii mnogokomponentnykh smesey* [Development of a class of mathematical models of rectification of multicomponent mixtures], *Kompyuternaya matematika* [Computer Mathematics], 2008, no. 2, pp.13-24. (*in Russian*).
11. Voroshin A.V., Nerobelov A.O., Polyanskiy A.V. *Model protsessa rektifikatsii v kolonne s paketnoy vikhrevoiy nasadkoy* [Model of the process of rectification in a column with a packet vortex nozzle], *Sbornik trudov III Vserossiyskoy studencheskoy nauchno-tekhnicheskoy konferentsii «Intensifikatsiya teplo-massoobmennyykh protsessov, promyshlennaya bezopasnost' i ekologiya»* [Collection of Proceedings of the III All-Russian Student Scientific and Technical Conference «Intensification of Heat-Mass Exchange Processes, Industrial Safety and Ecology»], Kazan, 2012, pp.224-228. (*in Russian*).
12. Holland C.D. *Fundamentals of multicomponent distillation*. McGraw-Hill Book Company, New York, 1981. 626 p.