

УДК 621.5:519.87

**В.Н. Таран**Одесская государственная академия холода, ул. Дворянская, 1/3, г. Одесса, Украина, 65082  
e-mail: vntaran@te.net.ua

## ОСОБЕННОСТИ РАСЧЁТА РЕКТИФИКАЦИИ ВОЗДУХА. 1. ПОЛУЧЕНИЕ АЗОТА ПОД ДАВЛЕНИЕМ

Проанализированы уравнения, описывающие процессы в аппаратах узла ректификации, исследовано поле концентраций в конденсаторе-испарителе и его влияние на давление кипения. Введено понятие расчётной функции ректификации и рассмотрены способы задания граничных условий для её определения. Сформулированы требования к количеству начальных параметров, вычислены коэффициенты влияния начальных величин на выходные. Построены расчётные алгоритмы и исследована их сходимость при разных описаниях процесса ректификации. Проведены контрольные расчёты и установлены причины отклонений балансовых соотношений. Показана необходимость для обеспечения полной внутренней согласованности расчёта создания расширенной модели, включающей как колонну, так и конденсатор-испаритель. Исследованы условия устойчивости алгоритма расширенной модели. По расширенной модели рассчитаны расходные характеристики узла ректификации для получения азота под давлением. Эти характеристики пригодны для управления качеством производимого азота.

**Ключевые слова:** Ректификация. Воздух. Азот. Кислород. Аргон. Математическая модель. Алгоритм. Внутренняя согласованность и устойчивость. Расширенная модель. Характеристики узла ректификации. Теоретическая тарелка.

**V.N. Taran**

## FEATURES OF AIR RECTIFICATION COMPUTATION. 1. PRODUCTION OF COMPRESSED NITROGEN

The equations, describing the processes in the rectification units have been analyzed. The concentration field in a condenser-evaporator and its influence on the boiling pressure has been investigated. The concept of rectification function has been formulated and the methods of the definition of boundary conditions have been examined. Requirements to the quantity of initial parameters have been defined. Factors of influence of the initial values on the finite data have been calculated. Calculation algorithms have been generated and the convergence of algorithms has been investigated at different methodical descriptions of rectification. The control calculations have been carried out and the reasons of unbalance results have been established. It is shown the necessity of providing with full internal co-ordination in the creation of the expanded model including both a column and the condenser-evaporator. Metering characteristics of rectification unit for nitrogen manufacturing have been calculated on the base of expanded model. These characteristics are suitable for quality control of production nitrogen.

**Keywords:** Rectification. Air. Nitrogen. Oxygen. Argon. Mathematical model. Algorithm. The internal coordination and convergence. The extended model. Characteristics of rectification unit. Theoretical plate.

### ОБОЗНАЧЕНИЯ:

$h'$ ,  $h''$  — энтальпии жидкой и паровой фаз;  
 $k$  — число компонентов разделяемой смеси;  
 $N_T$  — число тарелок в секции;  
 $n$  — номер тарелки;  
 $P$  — давление;  
 $q_{к-н}$ ,  $q_{рк}$ ,  $q_n$  — теплопритоки к конденсатору-испарителю, колонне и  $n$ -ой тарелке;  
 $R$ ,  $B$ ,  $A$  — кубовая жидкость, воздух, азот (потоки и расходы);

$V$ ,  $L$  — пар и жидкость;  
 $x_{Ar}$ ,  $y_{O_2}$  — содержания аргона (кислорода) в жидкой и паровой фазах;  
 $Z_{N_2}$  — функция ректификации;  
 $\eta$  — КПД тарелки.

### ИНДЕКСЫ:

Ar, O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub> — наименования компонентов смеси;  
нижние индексы в обозначениях — принадлежность параметра к потоку или точке схемы.

© В.Н. Таран

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Разделение воздуха с помощью низкотемпературной ректификации широко применяется для получения его компонентов. Эффективность работы воздушоразделительной установки (ВРУ) в значительной степени определяется надёжностью проектирования узла ректификации. На ранних этапах создания ВРУ главным достоинством методики расчёта ректификации считалась простота и наглядность, что было важно при ручных вычислениях. Развитие ЭВМ сняло проблему точности и скорости вычислительного процесса. Стало возможным вводить в расчётные методики существенно больше параметров, учитывать значительное число влияющих факторов. Одновременно методики перестали обладать наглядностью и прозрачностью алгоритма. Важную роль начал играть программист — посредник между разработчиком методики и ЭВМ, а также особенности его стиля программирования.

В таких условиях особое внимание нужно обращать на физическое обоснование расчётной модели, корректную постановку расчётной задачи и исследование свойств самой модели конкретного технологического процесса. К исследованию свойств модели следует отнести определение факторов влияния и значимости используемых расчётных параметров, оценку взаимодействия различных элементов конкретной схемы ВРУ.

### 2. УРАВНЕНИЯ ПРОЦЕССА РЕТИФИКАЦИИ

Процесс ректификации заключается в осуществлении интенсивного контакта движущихся противотоком насыщенных потоков пара и жидкости. Наиболее часто контакт потоков организуется на барботажных тарелках. В результате контакта потоки приближаются к равновесным состояниям. Движение противотоком приводит к тому, что равновесное состояние нарушается и на следующем контактном устройстве появляется разность концентраций компонентов. Так создаются условия для дальнейшего протекания процесса массообмена.

Процесс ректификации в тарельчатой колонне удобно рассматривать в виде схемы, представленной на рис. 1. Выделим двумя сечениями элемент колонны, охватывающий тарелку с номером  $n$ . Потокам пара  $V$  и жидкости  $L$  ниже тарелки присвоим индекс  $n$ , выше тарелки — индекс  $n-1$ .

Каждый поток характеризуется расходом, составом, давлением и энтальпией. Полная информация о потоке содержит  $k+2$  параметра, где  $k$  — число компонентов смеси.

Для представленного элемента можно составить уравнения балансов:

— общего материального баланса (одно уравнение)

$$V_n - L_n = V_{n-1} - L_{n-1} = C_0; \quad (1)$$

— материального баланса по каждому компонен-

ту ( $k-1$  уравнение)

$$V_n y_n^i - L_n x_n^i = V_{n-1} y_{n-1}^i - L_{n-1} x_{n-1}^i = C_i; \quad (2)$$

— энергетического баланса (одно уравнение)

$$V_n h''_n - L_n h'_n + q_n = V_{n-1} h''_{n-1} - L_{n-1} h'_{n-1} = H_{p,n-1}. \quad (3)$$

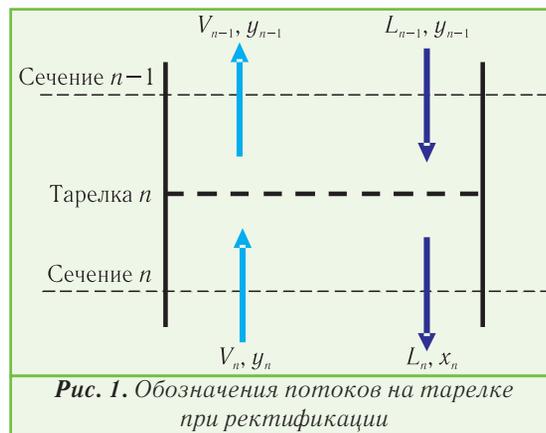


Рис. 1. Обозначения потоков на тарелке при ректификации

Отметим, что величины  $C_0$  и  $C_i$  не зависят от номера сечения и постоянны в пределах секции колонны. Величина  $H_{p,n-1}$ , называемая обычно энтальпийным полюсом секции, является переменной при наличии теплопритоков и меняется от сечения к сечению.

Учитывая, что  $V_n = L_n + C_0$ , представим (3) в виде:

$$L_n (h''_n - h'_n) + C_0 h''_n = H_{p,n-1} - q_n$$

или

$$L_n = \frac{H_{p,n-1} - q_n - C_0 h''_n}{h''_n - h'_n}. \quad (3a)$$

Используя уравнения (1)-(3), следует принимать во внимание, что значения давлений связаны соотношением:

$$P_n = P_{n-1} + \Delta P_n, \quad (4)$$

где  $\Delta P_n$  — сопротивление тарелки.

Нетрудно видеть, что для перехода от сечения  $n-1$  к сечению  $n$  необходимо определить новые значения  $V, L, x, y, h'$  и  $h''$ ,  $P$  — всего  $2k+3$  величины. Уравнения (1)-(4) дают  $k+2$  условия связи. Для осуществления расчёта процесса необходимо еще  $k+1$  уравнение. К ним относятся:

— уравнения, выражающие результаты процесса взаимодействия потоков на тарелке (с учётом КПД тарелки),

$$x_{i,n} = y_{i,n-1} + \eta_{i,n} (x_i^* - y_{i,n-1}); \quad (5)$$

— уравнения, описывающие равновесие пар-жидкость,

$$y_i^* = f(x_i, P) \text{ или } x_i^* = f(y_i, P). \quad (6)$$

Комбинируя уравнения (5) и (6), получим  $k-1$  уравнение вида

$$x_{i,n} = y_{i,n-1} + \eta_{i,n} [f(y_{i,n-1}, P) - y_{i,n-1}]. \quad (5a)$$

Последним недостающим звеном является калорическое уравнение состояния, записанное для пара и жидкости с учётом того, что потоки в колонне являются насыщенными:

$$h'_n = f_h(P, x_n) \text{ и } h''_n = f_h(P, y_n). \quad (7)$$

Особенность уравнений (7) состоит в том, что определяемая на их основе энтальпия должна соответствовать параметрам насыщенного пара или жидкости. При использовании уравнений (7) следует учитывать, что, как правило, эти параметры находятся из термического уравнения состояния

$$P = f_p(T, \rho, x_i). \quad (7a)$$

Из термического уравнения состояния в свою очередь определяются плотности равновесных пара и жидкости путём решения системы уравнений, учитывающих равенства химических потенциалов паровой и жидкой фаз.

Совокупность уравнений (1)-(7) даёт возможность производить расчёт ректификации, начиная с верхнего (нулевого) сечения и переходя от сечения над тарелкой к сечению под тарелкой. Исходные данные должны содержать полную начальную информацию, т.е.  $2k+3$  величины  $V, L, x, y, h', h'', P$  в начальном сечении. Применение соотношений (7) позволяет вычислить  $h'$  и  $h''$  по концентрациям и давлению потока, т.е. снизить число задаваемых параметров до  $2k+1$ .

В расчётах не всегда используют все уравнения связи из-за сложности или практического отсутствия некоторых зависимостей.

Известные методы расчёта процесса ректификации *Мак-Кэба* и *Тиле* [1] (для бинарной смеси) и *Наринского* (для тройной смеси) [1-3] базируются на уравнениях (1), (2) и (5). Уравнения (1)-(3), (5) и (7) применяются в методе *Поншо́на-Бошняковича* [4].

В дальнейшем изложении мы будем использовать три методики расчёта ректификации тройной смеси  $N_2$ -Аг- $O_2$ . Методика А основана на уравнениях (1), (2), (5) и (6), т.е. не учитывает изменение теплот испарения потоков, и расходы  $L$  и  $V$  принимаются постоянными по высоте колонны. Методика Б построена на дополнительно применяемом уравнении (3), в котором  $q_n=0$ , и уравнении (7). Методика В совпадает с методикой Б, но в ней принято, что  $q_n>0$ . Для воздуха как тройной смеси  $N_2$ -Аг- $O_2$  методика А эквивалентна подходу Наринского [3], а методики Б и В — методу *Льюиса-Мачесона* [5].

Для построения расчётного алгоритма необходимо использовать дополнительные условия, вытекающие из сути процесса ректификации. Величина КПД тарелки  $\eta_{i,n}$  является сложной функцией составов пара и жидкости, конструкции тарелки, гидродинами-

ческих режимов течения жидкости и прохождения пара через слой жидкости и иных факторов [6,7]. Часто расчётное определение КПД тарелки по каждому компоненту не производится, и расчётчики ограничиваются заданием его возможного значения. Нами в расчётах КПД принимался равным 1,0 как для теоретической тарелки.

Учёт теплопритоков в уравнениях (3) также требует отдельного анализа тепловых потоков в области тарелки. В дальнейших вычислениях принималось, что теплоприток извне полностью воспринимается жидкой фазой. В пользу такого допущения говорят более низкая температура жидкости (по сравнению с паром) на тарелке и более высокие коэффициенты теплоотдачи жидкой фазы.

Если воздух рассматривать как тройную смесь  $N_2$ -Аг- $O_2$ , что допустимо в силу малых значений примесей иных газов, то задача расчёта по уравнениям (7) и (7a) упрощается. Нами были использованы зависимости [8], полученные *Вассерманом* и сотрудниками на основании данных Наринского [3], а уравнение (7) выведено самостоятельно.

Рассмотрим принцип построения алгоритма шага расчёта ректификации «сверху вниз» при известных потоках в сечении  $n-1$  над тарелкой  $n$ .

Алгоритм шага потарелочного расчёта сводится к реализации следующей последовательности:

а) задаём  $V, L, x, y, h'', h'$  и  $P$  в сечении  $n=0$ , т.е. над тарелкой 1;

б) вычисляем  $C_0, C_i, H_{p,0}, \eta_1, q_1$  и т.д.;

с) проводим расчёт  $P_n = P_{n-1} + \Delta P_n$ ;

д) рассчитываем  $x_n = y_{n-1} + \eta_n [f(y_{n-1}, P) - y_{n-1}]$ ;

е) определяем  $h'_n = f_h(P_n, x_n)$ ; (8)

ф) принимаем  $L_n = L_{n-1}$ ;

г) находим  $V_n = L_n + C_0$ ;

h) рассчитываем  $y_n = (L_n x_n + C_i) / V_n$ ;

и) определяем  $h''_n = f_h(P_n, y_n)$ ;

ж) выполняем расчёт  $L_n = \frac{H_{p,n-1} - q_n - C_0 h''_n}{h''_n - h'_n}$ .

Если  $L_n$  по пункту ж не совпадет с принятым в пункте ф, то значение  $L_n$  корректируем и снова переходим к пункту г.

Указанный алгоритм позволяет осуществлять шаги перехода от сечения к сечению. Именно эти шаги являются объектом пристального внимания большинства исследователей и расчётчиков. Изложенный выше подход основан на вполне строгих соотношениях и учитывает все основные виды взаимодействия потоков между собой и со средой.

Важным условием получения надёжного результата является корректное задание граничных условий. Влияние задания параметров потоков на верхней тарелке на дальнейшее протекание процесса ректификации иллюстрируется рис. 2.

Эти значения в реальных установках определяют входящими в колонну потоками и зависят от схемы организации питания колонны. Поэтому расчёт ректификации не может производиться в отрыве от анализа схемы узла ректификации.

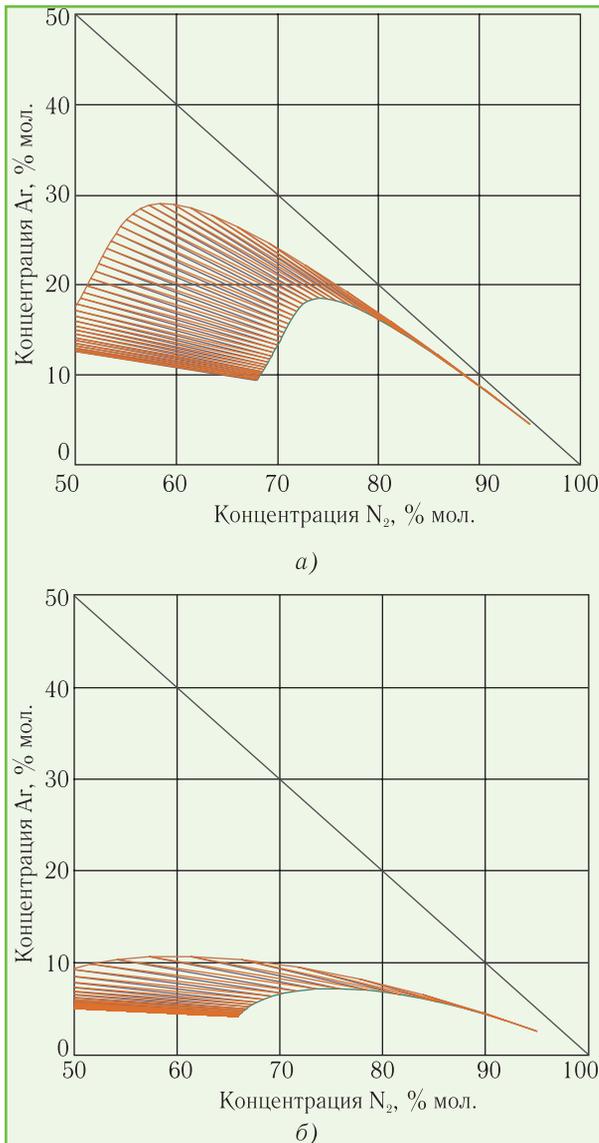


Рис. 2. Протекание процесса ректификации при разных начальных значениях составов

### 3. СХЕМЫ ПОЛУЧЕНИЯ АЗОТА ПОД ДАВЛЕНИЕМ

Схема узла получения азота ректификацией зависит от требований к давлению получаемого продукта,

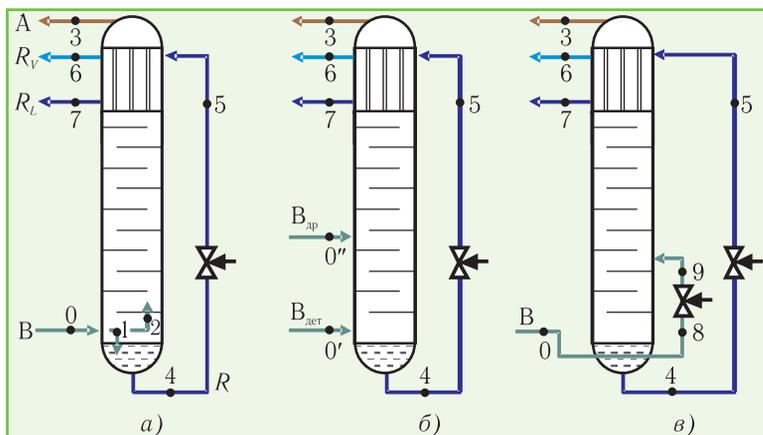


Рис. 3. Варианты схем колонн для извлечения азота из воздуха

его состоянию (жидкий или газообразный) и производительности установки, которая обуславливает вид цикла и технологической схемы ВРУ и удельные потери холода. Как правило, узел ректификации при получении азота состоит из одной колонны и конденсатора-испарителя. Давление получаемого продукта обычно составляет 0,3-0,8 МПа.

В ВРУ небольшой производительности применяются циклы высокого и среднего давлений с детандером. В них воздух в колонну подается одним потоком (рис. 3,а), т.е. дроссельный и детандерный потоки объединяются перед поступлением в колонну, или раздельно (рис. 3,б). Если воздух перед поступлением в колонну имеет давление более высокое, чем в колонне, его подача может осуществляться через змеевик в кубе колонны (рис. 3,в). Последние схемы могут обеспечить повышенный коэффициент извлечения азота.

В крупных установках (и особенно при получении азота под давлением 0,6 МПа и выше) реализуется цикл с детандером на обратном потоке. В таких схемах давление в колонне определяется требованием обеспечения давления в конденсаторе-испарителе на уровне, достаточном для получения необходимой холодопроизводительности в цикле. Накопление неонгелиевой смеси и её отвод из конденсатора-испарителя учитывать не будем, т.е. конденсатор-испаритель рассматривается как полный (а не как парциальный). Выберем для последующего анализа схему рис. 3,а с простым вводом воздуха.

Для предотвращения накопления взрывоопасных примесей из конденсатора-испарителя выводится жидкий поток безопасности  $R_L$ , обеспечивающий прочность аппарата.

Схема испарения кубовой жидкости в конденсаторе-испарителе показана на рис. 4. В конденсатор-испаритель поступает поток кубовой жидкости  $R$  после дроссельного вентиля. В результате дросселирования и самоиспарения образуется паровая  $R''$  и жидкая  $R'$  фазы. Жидкая фаза собирается в нижней части испарителя и кипит под действием подводимого тепла. Часть

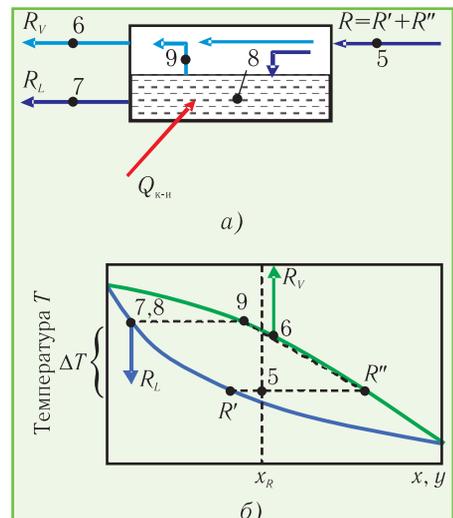


Рис. 4. Схема испарения кубовой жидкости в конденсаторе-испарителе (а) и представление процессов в  $T,x,y$ -диаграмме (б)

жидкой фазы в виде потока безопасности  $R_L$  выводится из конденсатора-испарителя. Паровая фаза  $R''$  проходит испаритель, практически не участвуя в теплообмене, и смешивается с парами 9, образовавшимися при испарении жидкой фазы.

Потоки  $R''$  и  $R_L$  относительно невелики. Поэтому состав потока 6 близок к составу кубовой жидкости 5, а состав жидкости, кипящей в конденсаторе-испарителе (состояние 8), близок к равновесному с паром 6. Это означает, что концентрация жидкости 8 будет заметно отличаться от состава кубовой жидкости  $R$  и от состава потока  $R_L$ . Температура кипения смеси  $T_8$  заметно выше  $T_5$ .

Запишем уравнения материального баланса жидкости, кипящей в конденсаторе-испарителе, как

$$R'' = \beta R + V_9 \text{ или } V_9 = (1 - \beta)R, \quad (9)$$

где  $\beta$  — доля потока безопасности  $R_L$ ;  $V_9$  — расход пара, образующегося при кипении кубовой жидкости.

Для каждого компонента можно записать соотношение:

$$R'x_R = \beta R x_8 + V_9 f(x_8). \quad (10)$$

Величина  $x_R$  соответствует составу жидкой фазы  $R'$  кубовой жидкости после дросселирования.

Соотношение (10) содержит  $k-1$  уравнение и  $k-1$  неизвестную величину  $x_8$  для компонентов. Из-за нелинейной связи концентраций пара и жидкости соотношение (10) является системой нелинейных уравнений. Для определения состава пара  $y_6$ , выходящего из конденсатора-испарителя, следует использовать уравнения смешения потоков  $V_9$  и  $R''$ . Так как поток 6 образуется смешением указанных потоков, то состояние 6 не является строго сухим насыщенным паром. Однако отклонения от этого состояния весьма невелики.

Как отмечалось выше, состав жидкости 8, кипящей в аппарате, существенно отличается от состава кубовой жидкости, и это сказывается на температуре её кипения. В рассматриваемом случае при  $x_R = 33\% \text{ O}_2$  получается  $x_8 = 62,12\% \text{ O}_2$ . Из-за повышенного содержания кислорода (и аргона) температура кипения  $T_8$  по сравнению с температурой кипения кубовой жидкости (при том же давлении в аппарате) повышается на 3,34 К.

Для сохранения температурного напора в конденсаторе-испарителе необходимо снижать давление кипения, что особенно важно учитывать при использовании этого давления для выработки холода в детандере на обратном потоке. В рассматриваемом случае снижение давления составит 0,096 МПа (с 0,386 до 0,29 МПа). Это эквивалентно снижению холодопроизводительности цикла с детандером на обратном потоке примерно на 20 %.

#### 4. ИССЛЕДОВАНИЕ ОПЕРАЦИЙ РАСЧЕТА РЕКТИФИКАЦИИ

Под расчётом ректификации обычно понимают

определение числа теоретических тарелок, необходимых для получения продуктов заданной чистоты. При этом результатом расчёта является число тарелок, представленное нецелым числом (например, 18,37 тарелки). Понятие дробной части теоретической тарелки имеет только формальное определение, не подкреплённое физическим смыслом процесса. Особенно такая неопределённость характерна для многокомпонентных смесей. Более строгим, по нашему мнению, является выполнение расчётов при фиксированном числе тарелок (с определением концентраций продуктов разделения).

Расчёт ректификации состоит в последовательном применении соотношений (1)-(7) в соответствии с алгоритмом расчёта тарелки (8). Как указано ранее, последовательный расчёт требует знания  $2k+1$  параметров в начальном сечении  $n=0$ . В результате расчётного шага определяются  $2k+1$  параметров в следующем сечении, которое является исходным для следующего шага.

Таким образом, при расчёте секции колонны кроме начальных значений необходимо знать ещё количество шагов — число тарелок  $N_T$ . Оно может рассматриваться как управляющий параметр функции ректификации, связывающей параметры потоков в начальном и конечном сечениях секции колонны. Функция ректификации есть совокупность расчётных процедур в соответствии с алгоритмом (8), повторённых  $N_T$  раз. Результат каждого шага (расчёта тарелки) однозначно определяется совокупностью применяемых для описания процесса соотношений и набором начальных параметров. Поэтому результат любого  $n$ -го шага будет характеризоваться значением, которое не зависит от последующих шагов, т.е. имеет все признаки многопараметрической функции. Если набор параметров (вектор) потоков  $V$  и  $L$  в произвольном сечении обозначить как  $Z_n$ , то функцию ректификации можно представить выражением

$$Z_{N_T} = \Phi(Z_0, N_T).$$

Графический вид функции ректификации для тройной смеси  $\text{N}_2$ -Ar- $\text{O}_2$  показан на рис. 2. На рисунке чётко прослеживается влияние параметров начальной точки (в правом углу) на ход процесса ректификации. Понятие функции ректификации подчёркивает наличие однозначной связи между начальными и конечными параметрами. Оно облегчает понимание вычислительной сути расчёта процесса ректификации. Расчёт процесса представляет собой определение составляющих функции с заданными граничными условиями. Из понятия функции ректификации вытекают следующие положения расчёта:

- между начальными и конечными параметрами существует однозначная связь;
- число исходных параметров для расчёта секции должно составлять  $2k+1$  значений, которые могут быть известными (заданными) как на начальной, так и конечной границах секции;
- при смешанном задании всех параметров на

двух границах секции неизбежно применение итерационного процесса расчёта; математически это эквивалентно нахождению корней системы нелинейных уравнений, соответствующих принятой методике расчёта потарелочных шагов, что влияет на отображение процесса, но не изменяет алгоритм расчёта ректификации;

- в функцию ректификации могут быть введены дополнительные параметры и зависимости, например, теплопритоки, гидравлические сопротивления и т.п.

При фиксированном числе тарелок  $N_t$  расчёт должен начинаться с задания всех параметров потоков в начальном граничном (например, верхнем) сечении колонны. Совокупность исходных параметров включает значения расходов  $V_0$  и  $L_0$ , составов пара  $y_0$  и жидкости  $x_0$ , давления  $P_0$  в начальном сечении. При использовании методик Б и В с учётом указанных параметров производится расчёт энтальпий  $h_0''$  и  $h_0'$ .

После применения расчётных процедур  $N_t$  раз получаем значения параметров жидкости, стекающей с нижней тарелки, и параметров пара, поступающего под нижнюю тарелку. Алгоритм расчёта должен предусматривать точное указание критериев завершения расчёта. К сожалению, в литературе этот аспект изложен недостаточно строго.

Так, в книге [2] рекомендуется проводить потарелочный расчёт до тех пор, пока содержание аргона в жидкости, стекающей с нижней тарелки, не станет равным содержанию аргона в кубовой жидкости. В действительности, кубовая жидкость образуется смешением жидкой фазы поступающего воздуха и жидкости с последней тарелки. В общем случае, эти потоки имеют разные составы и не совпадают с составом кубовой жидкости.

Единственным критерием должно быть полное

совпадение расчётных величин для паровой фазы последнего (нижнего) сечения со всеми параметрами паровой фазы вводимого на разделение воздуха. Это условие является замыкающим для системы расчётных соотношений. Оно же следует и из понятия функции ректификации как удовлетворяющее конечным граничным условиям. Дополнительную сложность в расчёт ректификационной секции вносит требование соблюдения общего материального баланса по входящим и выходящим потокам. Существование условия замыкания позволяет сформулировать метод вычисления числа тарелок. Алгоритмы расчёта секции при заданном числе тарелок  $N_t$  или при фиксированном содержании кислорода в продукционном азоте, как следует из рис. 5, несколько различаются.

При несовпадении параметров замыкания необходима корректировка данных о потоках в начальном (верхнем) сечении. С вычислительной точки зрения наиболее удобными являются методы простых итераций и Ньютона [9]. Для построения эффективного алгоритма коррекции начальных данных необходимо знать характер связи начальных и конечных расчётных параметров. Информация об этом должна носить не только качественный, но и количественный характер. Одним из путей установления зависимостей является выполнение расчётов по разным методикам с варьированием начальных параметров в широких пределах. Исследование зависимостей должно предусматривать определение коэффициентов влияния всех начальных параметров на все выходные. Исследуются как прямые связи, например, начальной концентрации кислорода с концентрацией кислорода на выходе, так и перекрёстные, например, начальной концентрации кислорода с концентрацией аргона на выходе. В качестве влияющих параметров служат

концентрации, расходы потоков и их отношения, количество тарелок, теплопритоки, массообменные и гидравлические эффекты.

Ввиду сложности процесса и многоступенчатости контактов на тарелках можно ожидать, что связь начальных и конечных расчётных параметров является существенно нелинейной. Это в полной мере проявилось при расчётах многосекционных колонн (например, верхней колонны узла разделения воздуха) и при широких интервалах изменения параметров. Однако для колонны извлечения азота из воздуха, в которой процесс осуществляется в узком интервале изменения концентраций (по азоту от 78 до 100 %), выявленные связи имеют более

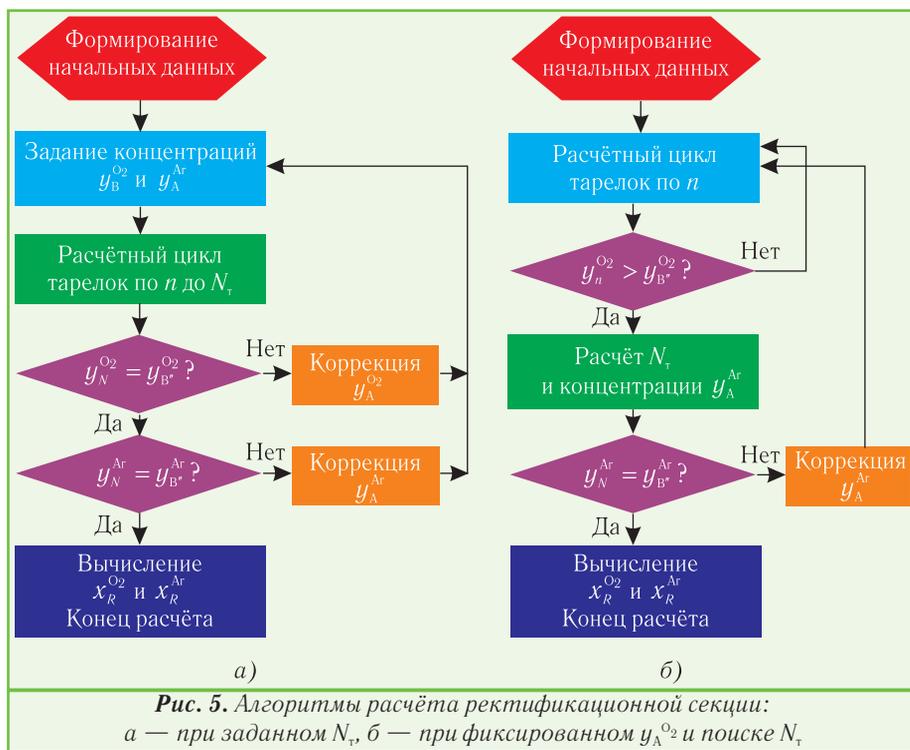
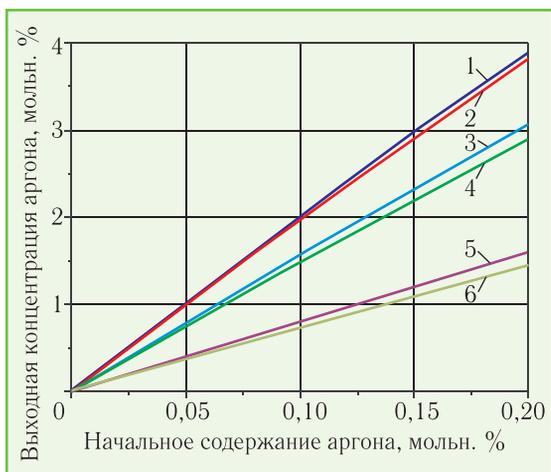


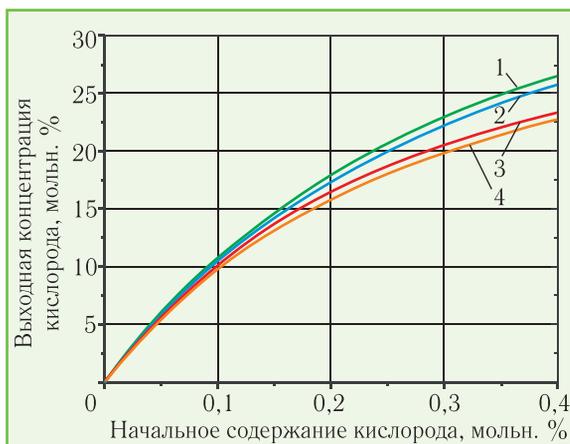
Рис. 5. Алгоритмы расчёта ректификационной секции: а — при заданном  $N_t$ , б — при фиксированном  $y_A^{O_2}$  и поиске  $N_t$

простой характер.

Рисунки 6-8 характеризуют взаимозависимости начальных и конечных величин для контрольного примера при 10-ти теоретических тарелках и фиксированных остальных параметрах. Как видно из приведённых графиков, зависимости выходных концентраций кислорода и аргона от начальных концентраций аргона практически линейны. Это связано с тем, что содержание аргона во всех сечениях колонны не превышает нескольких процентов. Влияние кислорода сложнее и зависимости нелинейны.



**Рис. 6.** Влияние начальных концентраций аргона на его выходные при 10-ти теоретических тарелках в секции: 1, 3, 5 — расчёт по методике А; 2, 4, 6 — по методике Б (1, 2 — начальное содержание кислорода 0,001 %; 3, 4 — 0,1 %, 5, 6 — 0,5 %)



**Рис. 7.** Влияние начальных концентраций кислорода на его выходные при 10-ти теоретических тарелках в секции: 1, 3 — расчёт по методике А; 2, 4 — по методике Б (1, 2 — при 0,001 % Ar; 3, 4 — при 0,5 % Ar)

Кривые для одноимённых компонентов проходят через начало координат, что позволяет представить их соотношениями вида

$$y_s = B_k y_0^b, \tag{11}$$

где  $y_s$  — конечная расчётная концентрация в нижнем

сечении;  $y_0$  — начальная концентрация в верхнем сечении колонны;  $B_k$  — коэффициент пропорциональности компонента  $k$ .

Коэффициент степени  $b$  для аргона можно принимать равным 1, для кислорода  $b=0,7...0,8$ . При известном коэффициенте  $b$  непосредственно в процессе расчёта ректификации легко определить коэффициент пропорциональности  $B_k$ .

Значительно сложнее оказываются зависимости перекрестного влияния компонентов. Эти кривые не проходят через начало координат (рис. 8), но для Ar зависимость практически линейна с угловым коэффициентом  $-6...-7$ . Были исследованы и другие зависимости: влияние числа тарелок, флегмового отношения, КПД тарелок и т.д. Но они оказались менее продуктивны, меньше применимы в процедурах расчёта ректификации.

Как следует из схем реализации алгоритмов (см. рис. 5), расчёт ректификации является итерационным, требующим уточнения начальных значений концентраций компонентов в верхнем сечении колонны. Это можно произвести с использованием соотношения (11). Тогда корректирующая система имеет вид:

$$y'_0 = y_0 \left( \frac{y_{Br}}{y_{Nr}} \right)^{1/b}, \tag{12}$$

где  $y'_0$  — уточнённое значение концентрации компонента в начальном сечении.

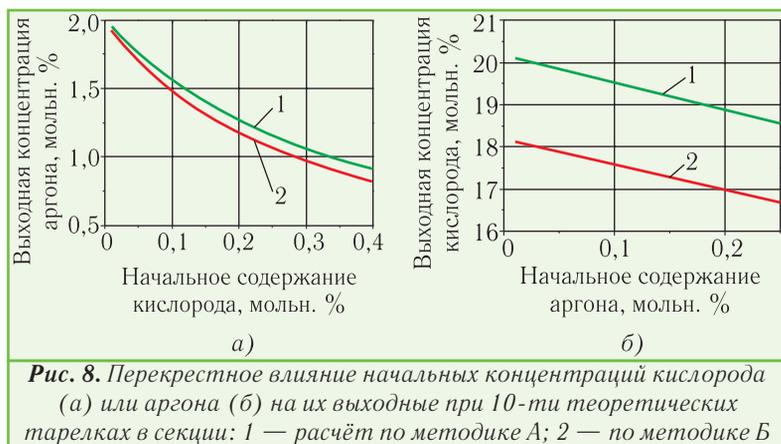
Расчёты по алгоритму, характеризующему рис. 5,а, требуют выполнения коррекции концентраций двух компонентов, в то время как при использовании алгоритма, представленного на рис. 5,б, осуществляется уточнение концентрации только одного компонента — аргона. С учётом соотношений (12) достижение точности расчёта по концентрациям лучше  $1 \cdot 10^{-5}$  мольн. % по алгоритму рис. 5,б выполняется за 4...5 итераций. По алгоритму рис. 5,а та же точность получается после 20...35 и более итераций (в зависимости от числа тарелок). Число итераций увеличивается при большем числе тарелок и при использовании методик Б и В.

Улучшить сходимость итерационных расчётов можно, используя для уточнений не только коэффициенты однородных влияний  $C_{kk}$  и  $C_{jj}$ , но и перекрёстные  $C_{kj}$  и  $C_{jk}$  (см. рис. 8). Искомые уточнения концентраций компонентов в начальном сечении  $\Delta y_s^k$  и  $\Delta y_s^j$  должны находиться из системы уравнений невязок:

$$\begin{aligned} \Delta y_s^k &= C_{kk} \Delta y_0^k + C_{kj} \Delta y_0^j; \\ \Delta y_s^j &= C_{jk} \Delta y_0^k + C_{jj} \Delta y_0^j, \end{aligned}$$

где  $\Delta y_s^k$  и  $\Delta y_s^j$  — отклонения концентраций компонентов  $k$  и  $j$  в конечном сечении.

Как отмечалось выше, для проведения расчёта ректификационной секции необходимо задать значения расходов  $V_0$  и  $L_0$ . Они могут быть определены только за счёт привлечения дополнительных данных о



работе конденсатора-испарителя.

### 5. УЧЁТ ВЛИЯНИЯ ВНЕШНИХ ВЗАИМОСВЯЗЕЙ ПРИ РАСЧЁТЕ УЗЛА РЕКТИФИКАЦИИ

Работа узла ректификации обеспечивается внешними устройствами. Флегмовое питание колонны создаётся конденсатором-испарителем, необходимая температура (состояние) воздуха на входе в колонну поддерживается криогенным циклом. В конденсаторе-испарителе кипит кубовая жидкость, полученная в колонне. В криогенном цикле используется холод обратного потока производственного азота. На температуры этих потоков влияют схемные решения, например, наличие переохладителя кубовой жидкости и глубина переохладения. На протекании процессов сказываются гидравлические сопротивления всех элементов схемы, а также величины и распределение теплопотоков.

Как видно, в ходе расчёта процесса ректификации такие важные величины, как количество флегмы, количество и состав разделяемого пара, в значительной степени определяются внешними по отношению к колонне условиями и одновременно связаны с процессом ректификации.

Выполнение расчёта ректификации без учёта внешних взаимосвязей приводит к получению неполных и противоречивых результатов. Покажем это на примере схемы, изображённой на рис. 3,а. Принимаем следующие исходные данные: содержание кислорода в производственном азоте  $y_A^{O_2}=1\%$   $O_2$ , в кубовой жидкости  $x_R^{O_2}=32\%$   $O_2$ , число теоретических тарелок  $N_T=10$ . Значения потоков азота и кубовой жидкости составляют:  $A=0,356$  и  $R=0,644$ . При расчёте узла ректификации в качестве начальных значений приходится задавать достаточно произвольным образом концентрацию  $y_A^{Ar}=0,5\%$   $Ar$  (тогда  $y_R^{Ar}=1,17\%$   $Ar$ ) и использовать её в системе (13) для вычисления  $L_0$  и  $V_0$ .

Основные соотношения, связывающие указанные величины, перечислены ниже. Это уравнения теплового и материального балансов, записанные для разных контуров:

$$\begin{aligned}
 &V=A+R; \\
 &Vy_B=Ay_A+Rx_R; \\
 &Vh_0=Ah_3+Rh_4+q_{OC}; \\
 &T_8=T_3-\Delta T_{к-и}; \\
 &R'x_R=\beta Rx_8+V_0f(x_8); \\
 &Q_{к-и}=R[(1-\beta)h_6+\beta h_7-h_4]-q_{к-и}; \\
 &L_0=Q_{к-и}/(h_A''-h_A'); \\
 &V_0=L_0+A.
 \end{aligned} \tag{13}$$

Приведённые соотношения соответствуют классическому подходу, в котором исходные данные  $L_0$  и  $V_0$  для расчёта процесса ректификации получаются после определения тепловой нагрузки конденсатора-испарителя  $Q_{к-и}$ . Нагрузка

конденсатора-испарителя вычислена исходя из расхода кубовой жидкости  $R$  и её состава, которые найдены из приведённых выше исходных данных.

После расчёта секции по алгоритму, соответствующему рис. 5,а, определяются состав  $y_A^{Ar}$  и концентрация  $x_{N_T}$  потока жидкости  $L_{N_T}$ , покидающего нижнюю тарелку. Поток кубовой жидкости образуется смешением флегмы, стекающей с нижней тарелки  $N_T$ , и жидкой фазы поступающего воздуха. Это учитывается уравнениями:

$$L_{N_T}=R-B' \text{ и } x_R=(L_{N_T}x_{N_T}+B'x_B)/R. \tag{14}$$

Эти уравнения должны применяться при расчёте ректификации для соблюдения общего материального баланса. В табл. 1 приведены результаты расчёта узла ректификации по разным методикам.

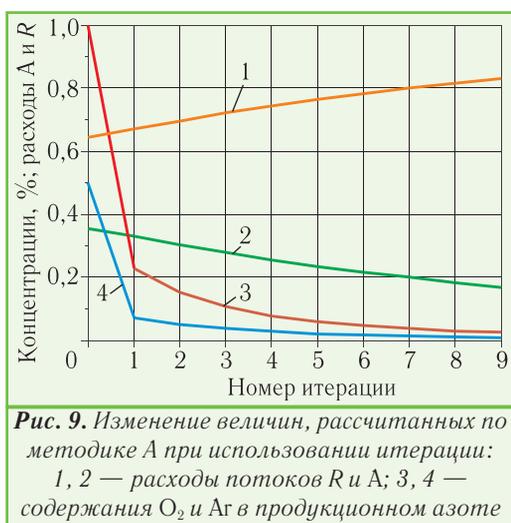
Сравнение результатов расчётов показывает, что найденное по методике А содержание кислорода в производственном азоте составило 0,2274 % вместо 1 %, а для кубовой жидкости вместо принятой величины 32 % получено 31,135 %. Для аргона отклонения ещё заметнее. Расхождение концентраций кислорода в кубовой жидкости по разным методикам превышает 1,9 %  $O_2$ . Отличаются и расходы кубовой жидкости. В строчках 6-8 табл. 1 показаны величины небалансов расходов потоков и компонентов, входящих в узел ректификации и выходящих из него. Например, при содержании кислорода во входящем воздухе 20,934 %  $O_2$  потоки А и R при новых концентрациях выносят кислорода по методике А на 0,8438 %  $O_2$  меньше, а по методике В — на 0,42675 %  $O_2$  больше. Разумеется,

**Таблица 1.** Сравнение результатов расчёта узла ректификации по разным методикам (без итерационных уточнений)

№	Расчётная величина	Методика А	Методика Б	Методика В
1	$y_A^{O_2}$ , мольн. %	0,227402	0,277055	0,233724
2	$y_A^{Ar}$ , мольн. %	0,072812	0,087432	0,075813
3	$R_{расч}=L_{N_T}+B'$	0,691580	0,615131	0,576908
4	$x_R^{O_2}$ , мольн. %	31,135363	32,332849	33,036622
5	$y_R^{Ar}$ , мольн. %	1,356580	1,400092	1,422603
6	$\Delta R=R_{расч}-R$	0,080202	0,003753	-0,034470
7	$\Delta y^{O_2}$ , мольн. %	-0,831830	-0,043490	0,426747
8	$\Delta y^{Ar}$ , мольн. %	-0,035021	-0,001808	0,017451

если использовать значения расхода  $R_{расч} = L_{N_{расч}} + B'$  и концентраций в нижнем сечении колонны, то баланс сохраняется, так как уравнения материальных балансов по сечениям входят в расчётные соотношения и выполняются неукоснительно. Но балансовые соотношения алгоритмов (см. рис. 5) строятся по данным начального сечения, которые заданы достаточно произвольно, что и приводит к указанным результатам.

Складывается парадоксальная ситуация, когда в результате расчёта ни одна из вычисленных величин не совпадает с заданными ранее значениями и не удовлетворяет базовым уравнениям балансов. На первый взгляд кажется рациональным подставить полученные значения в систему (13) и получить более согласованные величины. На рис. 9 показаны результаты 9-ти шагов такого «уточнения» при использовании методики А.



Расчёты показали стабильное изменение концентраций и расходов от итерации к итерации и отсутствие признаков стабилизации величин. Так, расход продукционного азота А снизился с 0,35645 до 0,16927, а концентрация кислорода в кубовой жидкости с 32 % до 25,213 % O<sub>2</sub>. Новые концентрации и расходы продукционных потоков пришли к значениям, не имеющим практического смысла.

Чем обусловлены такие результаты? Во-первых, недостатком методики А, в которой неверное расчётное значение расхода жидкой флегмы  $L_{N_t}$  в нижнем сечении приводит к неверным концентрациям в потоке R. Во-вторых, отсутствием ограничений в соотношениях (13) на значения расходов А и R, что не обеспечивает необходимую расчётную устойчивость.

Аналогичный приём для методики Б, которая показала наименьшие невязки без уточнений (см. табл. 1), также не привёл к лучшему результату, что подтверждает рис. 10.

При расчётах по методике Б в процессе итераций наблюдалось уменьшение расхода кубовой жидкости и снижение тепловой нагрузки конденсатора-испарителя, что вызвало на 9-ом шаге уменьшение флегмового орошения до уровня ниже минимально допусти-

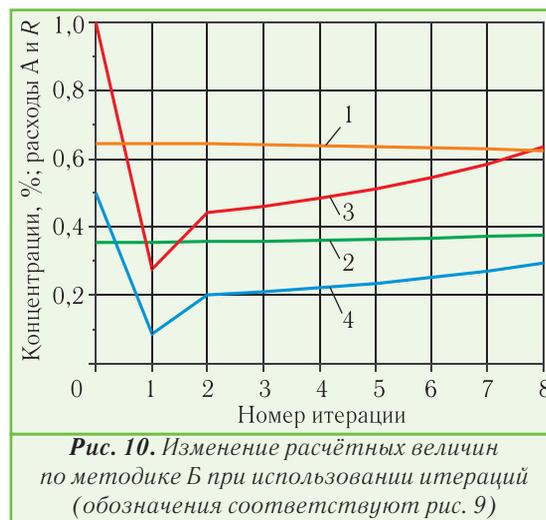
мого. В связи с этим расчёт был прерван.

Неудачи с достижением полной взаимной согласованности расчётных величин для всего узла ректификации потребовали более тщательного анализа всех аспектов вычислительных процедур на основе соотношений (1)-(5), (9), (13) и (14).

Как следует из алгоритма расчёта ректификационной секции, для начала расчёта необходимо задать значения  $2k+1$  параметров. В нашем случае ( $k=3$ ), это семь величин: А и  $L_0$ ,  $y_0$  и  $x_0$ , давление  $P_0$ . Из-за полной конденсации паров в конденсаторе-испарителе составы  $y_0$  и  $x_0$  совпадают. Рассмотрим варианты, когда число тарелок  $N_t$  известно. Для однозначности расчёта секции должны быть известны данные о потоке пара ( $B''$  и  $y_{B''}$ ). В результате будут вычислены  $y_{N_t}$  и  $x_{N_t}$ , R,  $x_R$ , а следовательно  $h_A''$  и  $h_R$ . Полученные данные о кубовой жидкости позволяют провести расчёт по соотношениям (9), (13) и (14). Этот этап расчёта определяет значения  $L_0$ ,  $R_V$  и  $R_L$ ,  $h_6$ ,  $h_7$  (дополнительно задаются  $\beta$ ,  $\Delta T_{к-и}$  и теплопритоки  $q_{к-и}$  и  $q_{рк}$ ). Из уравнения общего энергетического баланса узла ректификации

$$Vh_B = Ah_A'' + R_V h_6 + R_L h_7 - q_{к-и} - q_{рк} \quad (15)$$

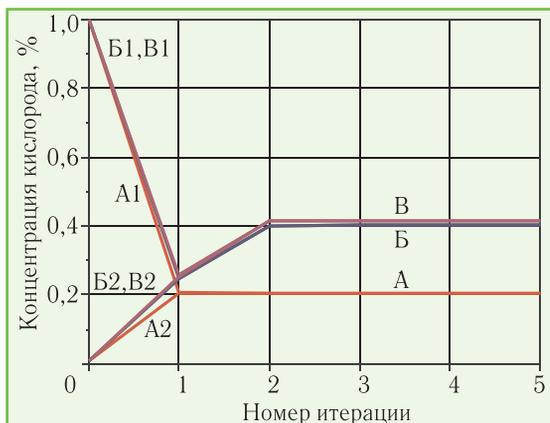
вычисляются  $h_B$ , а затем  $B''$  и  $y_{B''}$ , т.е. те величины, которые определяют расчёт секции.



Таким образом, большинство из заданных в качестве начальных величин переопределяется в результате вычислительных операций. Неизменными остались расход продукционного азота А, давление  $P_0$ , число тарелок  $N_t$ , величины  $\beta$ ,  $\Delta T_{к-и}$  и теплопритоки  $q_{к-и}$  и  $q_{рк}$ . Только перечисленные параметры могут считаться независимыми при расчёте узла ректификации, состоящего из колонны и конденсатора-испарителя. Используя в итерационных расчётах значения  $y_A$  и  $x_R$ , нами нарушалось это требование, так как величины А и R вычислялись исходя из составов  $y_A$  и  $x_R$ . В результате итерационный процесс стал неуправляемым. Поэтому для выполнения итерационных расчётов узла ректификации необходим алгоритм управления процессом, в котором начальные параметры  $L_0$ ,  $y_0$  и  $x_0$  будут задавать-

ся и корректироваться по результатам расчётов с помощью соотношений (1)-(5), (9), (13) и (14).

С соблюдением перечисленных рекомендаций были рассчитаны процессы в узле ректификации при  $A=0,35$  и числе теоретических тарелок  $N_T=10$  по трём методикам А, Б и В. Результаты представлены на рис. 11. Во всех расчётах уже на 5-ой итерации достигалась стабилизация концентраций компонентов в потоках лучше  $1 \cdot 10^{-5} \%$ .



**Рис. 11.** Изменение концентрации кислорода в производственном азоте в итерациях по уточнённому алгоритму при расчёте по методикам А, Б и В

Для проверки сходимости итерационных процессов при расчётах задавались различные начальные значения: 1 %  $O_2$  (линии с цифрой 1) и 0,01 %  $O_2$  (линии с цифрой 2). Уже на второй итерации расчётные значения практически совпадали.

Учёт взаимосвязи колонны и конденсатора-испарителя привёл к результатам, сведённым в табл. 2, которые заметно отличаются от приведённых в табл. 1.

**Таблица 2.** Сравнение результатов расчёта узла ректификации по разным методикам (с учётом взаимовлияния конденсатора-испарителя)

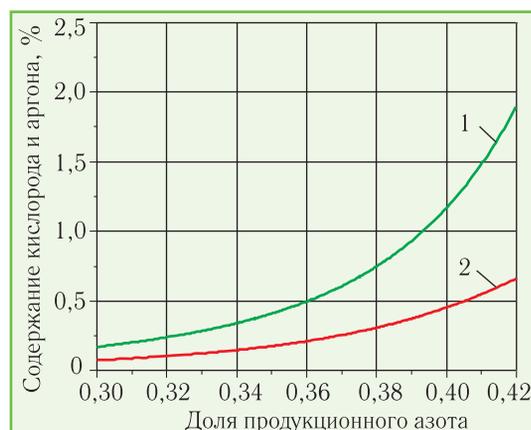
Расчётная величина	Методика А	Методика Б	Методика В
$y_A^{O_2}$ , мольн. %	0,241654	0,449572	0,460815
$y_A^{Ar}$ , мольн. %	0,077568	0,192373	0,196997

Содержания кислорода в производственном азоте, найденные по разным методикам (см. табл. 2), различаются почти в 2 раза, а аргона — в 3 раза. Вместе с тем, методики Б и В, основанные на учёте теплот смешения и теплопритоков, показали достаточно близкие результаты. Нужно также отметить, что полученные данные имеют высокую внутреннюю согласованность. Баланс компонентов соблюдается с точностью лучше  $5 \cdot 10^{-6} \%$ . По расходам только в методике А сохранилось прежнее значение дисбаланса, а методики Б и В снизили несогласованность расходов в 20 раз. Технически такая несогласованность вполне допустима, хотя усложнением алгоритма и программы в соответ-

ствии с математическими методами поиска корней [9] функции ректификации может быть почти полностью устранена.

Изложенный подход и его программная реализация могут служить не только для расчёта процесса ректификации, но позволяют исследовать статические характеристики узла ректификации в целом.

На рис. 12 представлены расчётные характеристики узла ректификации, отвечающего схеме на рис. 3,а, при 10-ти теоретических тарелках в колонне. Азот с содержанием кислорода менее 2 % можно получать при доле отбора 0,42, а при доле менее 0,31 получается азот чище 0,2 %  $O_2$ . Эти результаты найдены без учёта гидравлических сопротивлений тарелок и при их КПД=1,0. При расчёте учитывались теплопритоки к колонне, которые приняты равными 4 кДж/кмоль воздуха к каждой теоретической тарелке. При изменении отбора меняется и содержание аргона в продукте. Полученный результат хорошо известен практически и используется для регулирования чистоты производственного азота. Так как кривые получены расчётным путём, было бы интересно их сопоставить с опытными данными.



**Рис. 12.** Влияние отбора азота на содержание компонентов в нём: 1 — кислород; 2 — аргон

## 6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Современное машиностроение требует создания и внедрения высокоточных математических моделей для проектирования и управления процессами. Такие модели должны учитывать все наиболее значимые взаимодействия и наилучшим образом отображать не только качественные, но и количественные характеристики процесса.

Математическая модель процесса ректификации воздуха должна учитывать влияние аргона, зависимости теплот испарения компонентов от температуры и состава и другие явления.

Эффективная программная реализация математической модели процесса ректификации невозможна без изучения свойств самой модели. Сформулированное понятие расчётной функции ректификации позволило выявить и определить требования к исходным данным расчёта. Проведёнными вычислительными

экспериментами установлены коэффициенты зависимости входных и выходных концентраций как для одноимённых, так и перекрёстных влияний. Недостаток классических подходов определения параметров потоков в колонне вызван отсутствием внутренней согласованности расчётных величин.

Согласованности можно добиться только учётом взаимного влияния друг на друга всех аппаратов узла ректификации — колонны, конденсатора-испарителя, переохладителей, а также потоков в них. Включение конденсатора-испарителя в расчётную модель устранило неопределённость в количестве получаемой флегмы и позволило добиться минимального дисбаланса (менее  $1 \cdot 10^{-5} \% O_2$ ) в расчётных величинах.

Из анализа результатов моделирования работы конденсатора-испарителя следует, что при кипении в нём кубовой жидкости происходит повышение концентрации кислорода. Для сохранения заданной разности температур необходимо снижать давление кипения. Оно может составлять 20...25 %.

Анализ переменных расширенной модели показал, что единственной независимой величиной является доля отбора продукционного азота. Несоблюдение этого условия приводит к неустойчивости вычислительного процесса. Установлена однозначная связь между величиной отбора и чистотой получаемого азота. Выполненные расчёты указывают на количественную зависимость чистоты азота от доли отбора, что может служить ориентиром при проектировании систем автоматизации и управления установкой.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Разделение воздуха методом глубокого охлаждения. В 2-ух т. Т.1. Термодинамические основы разделения воздуха, схемы и аппараты воздуходелительных установок. Под ред. **В.И. Епифановой** и **Л.С. Аксельрода**. — М.: Машиностроение, 1973. — 472 с.
2. **Архаров А.М., Марфенина И.В., Микулин Е.И.** Криогенные системы. В 2-ух т. Т.1. Основы теории и расчёта. — М.: Машиностроение, 1996. — 576 с.
3. **Наринский Г.Б.** Ректификация воздуха. — М.: Машиностроение, 1978. — 248 с.
4. **Бошнякович Ф.** Техническая термодинамика. В 2-ух ч. Ч.2. — М.-Л.: Гос. энерг. изд-во, 1956. — 255 с.
5. **Васютинский С.Ю.** Теоретические основы разделения смесей. — Одесса: Астропринт, 2006. — 138 с.
6. Криогенные системы. В 2-ух т. Т.2. Основы проектирования аппаратов, установок и систем/ **А.М. Архаров, И.А. Архаров, В.П. Беляков** и др. — М.: Машиностроение, 1999. — 720 с.
7. **Кафаров В.В.** Основы массопередачи. — М.: Изд. «Высшая школа», 1972. — 494 с.
8. Программное обеспечение проектирования воздуходелительных установок/ **А.А. Вассерман, С.В. Бодюл, А.В. Троценко, Г.К. Лавренченко**// Технические газы. — 2003. — № 1. — С. 43-50.
9. **Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М.** Численные методы. — М.: Бином, 2003. — 630 с.



## Повышение квалификации по специальности "Криогенная техника и технология",

организуемое Украинской ассоциацией производителей технических газов "УА-СИГМА"  
на базе Одесской государственной академии холода



- изучаемые дисциплины: термодинамические процессы, циклы и схемы криогенных воздуходелительных установок; снижение энергопотребления при эксплуатации ВРУ и новые технологии разделения воздуха; современные приборы контроля и автоматизация криогенных ВРУ; компрессорное оборудование ВРУ; охрана труда при производстве и использовании продуктов разделения воздуха;
- форма обучения — очно-заочная;
- начало обучения — 15,16 марта 2010 г. (установочные занятия);
- период самостоятельного обучения по предоставленным слушателям методическим материалам и учебным пособиям — 17 марта-12 апреля 2010 г.;
- лекционно-лабораторная и экзаменационная сессия — 13-16 апреля 2010 г.;
- контингент — инженеры и техники;
- по окончании выдается свидетельство Министерства образования и науки Украины

Условия приема по контактному тел./факсу: +380 (48) 777-00-87  
и e-mail: [uasigma@paco.net](mailto:uasigma@paco.net).  
Наш сайт: [www.uasigma.odessa.ua](http://www.uasigma.odessa.ua)