

双组分精馏塔的通用电算程序

曹元珍

(厦门大学化工系, 厦门, 361005)

摘要 通用电算程序能对精馏过程中出现一个或多个挟点的情况进行最小回流比的计算, 并用优化原理来确定适宜回流比, 通用性较强, 计算结果合理。

关键词 精馏塔 回流比 电算

1 前言

刊物上发表的双组分精馏塔的电算程序很多^[1-4], 但“通用性”均不够强, 主要是因为对那些偏差程度较大的非理想溶液(如乙醇-水溶液, 丙酮-水溶液)求算最小回流比较为困难。现有的电算程序大致分为两种类型: 一类仅讨论理想溶液或偏差程度不太大的非理想溶液, 另一类电算程序先用人工作图法从 a 点(x_D, y_D)作平衡线的切线, 再由切线的斜率或截距求最小回流比 R_{min} , 然后通过“人机对话”的方式, 将此 R_{min} 输入到程序中, 属半手算半机算程序。

本文编制的电算程序既适用于理想溶液, 也适用于非理想溶液, “通用性”较强, 并用优化原理选择适宜的回流比, 使计算结果更为合理。

2 过程的数学描述

2.1 计算塔的模式, 见图 1。

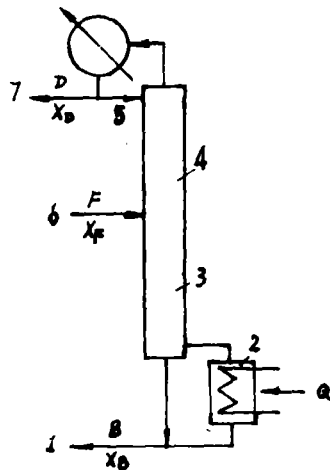


图1 单进料精馏塔参数关系示意图

- 1. 塔底产品 2. 再沸器 3. 提馏段
- 4. 精馏段 5. 回流 6. 进料 7. 塔顶产品

2.2 相平衡方程

要对双组分精馏塔进行设计计算, 必须要有汽液两相的平衡关系, 并绘制成曲线图, 该相平衡曲线的数据来源大致有三种途径:

2.2.1 由理想组分的蒸汽压来计算

2.2.2 由非理想组分的部分非理想参数来估算

2.2.3 实验数据

不管数据来源如何, 都必须能精确地表达所考虑组分的相平衡关系。

对理想溶液, 汽-液相平衡关系可简单地用下式计算:

$$y = \frac{\alpha x}{1 + (\alpha - 1)X} \dots\dots\dots (1)$$

式中: α —理想溶液纯组分 A 对纯组分 B 的相对挥发度。

对非理想溶液, 可用下式进行计算, 但相对挥发度要用活度系数进行修正:

$$y = \frac{\alpha' x}{1 + (\alpha' - 1)X} \dots\dots\dots (2)$$

$$\alpha' = \alpha \frac{\gamma_A}{\gamma_B} \dots\dots\dots (3)$$

式中: α' —非理想溶液纯组分 A 对纯组分 B 的相对挥发度;

γ_A —组分 A 的活度系数;

γ_B —组分 B 的活度系数;

对于输入实验数据的情况, 求数据点之间的汽液相平衡关系时, 可用最小二乘法将汽液相平衡数据拟合成一元 n 次多项式:

$$y = \sum_{i=0}^n A_i X^i \dots\dots\dots (4)$$

2.3 物料衡算方程和操作线

总物料衡算式:

$$F = D + W \quad \dots\dots\dots (5)$$

对易挥发组分衡算:

$$F x_f = D x_D + W x_w \quad \dots\dots\dots (6)$$

精馏段操作线方程:

$$y_{n+1} = \frac{R}{R+1} X_n + \frac{X_D}{R+1} \quad \dots\dots\dots (7)$$

提馏段操作线方程:

$$y'_{m+1} = \frac{L+gF}{L+gF-W} X'_m - \frac{W}{L+gF-W} X_w \quad \dots\dots\dots (8)$$

2.4 进料线方程:

$$y = \frac{g}{g-1} X - \frac{X_f}{g-1} \quad \dots\dots\dots (9)$$

3 问题的求解^[5]

3.1 最小回流比的计算

任何精馏塔的计算,均要从计算最小回流比开始。

对于理想溶液和偏差程度不太大的非理想溶液,精馏段和提馏段的操作线与进料线和平衡线相交于进料板处,见图2。

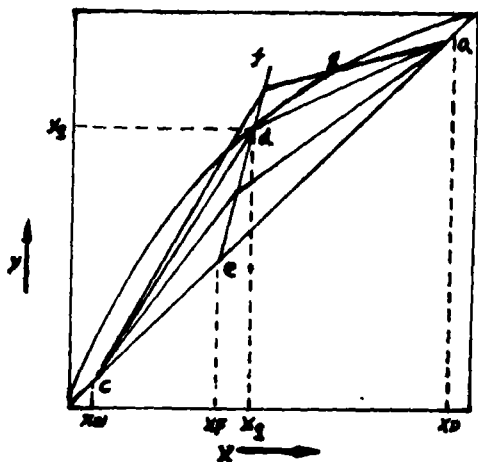


图2 最小回流比的确定

此时,可由平衡线方程(1)和进料线方程(9)联立求其交点(x_g, y_g),这样精馏段操作线的斜率为:

$$\left(\frac{L}{V}\right)_{\min} = \frac{R_{\min}}{R_{\min}+1} = \frac{y_D - y_g}{x_D - x_g} \quad \dots\dots\dots (10)$$

从而可求得最小回流比:

$$R_{\min} = \frac{y_D - y_g}{y_g - x_g} \quad \dots\dots\dots (11)$$

对于偏差程度较大的非理想溶液(如乙醇-水溶液,丙酮-水溶液)在操作线与g线的交点尚未落到平衡之前。操作线已与平衡线相切,见图3。

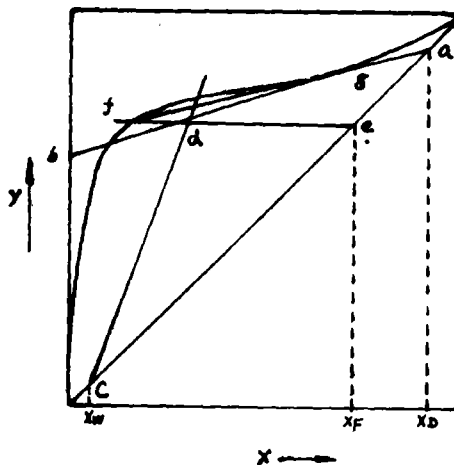


图3 不正常平衡曲线的 R_{min}的确定

这时有两个挟点,一个在精馏段操作线和平衡线相切处(点g),另一个在进料板处。根据精馏过程的特点,对于这种情况下 R_{min}的求法是由点 a(x_D, y_D)向平衡线作切线,再由切线的截距或斜率求 R_{min}。此时, R_{min}的计算可用下法^[6]进行:

3.1.1 任取某个 X 作为初值,由相平衡方程(4)求得 y。

3.1.2 对相平衡方程(4)求导,以便求出 X 点处的平衡线斜率:

$$S = \frac{d(\sum_{i=0}^m A_i X^i)}{dX} = \sum_{i=0}^{n-1} (i A_i) X^{i-1} \quad \dots\dots\dots (12)$$

3.1.3 X 点切线方程为:

$$y = SX + B \quad \dots\dots\dots (13)$$

上式移项,求得截距 B:

$$B = y - SX \quad \dots\dots\dots (14)$$

3.1.4 如果该切线恰是最小回流比时的精馏段操作线,它必定通 a 点(x_D, y_D),故可求得:

$$X'_D = \frac{B}{1-S} \quad \dots\dots\dots (15)$$

3.1.5 校核由上式计算出的 x'_D 与分离规定的 x_D 是否一致,如果不一致,则重新设置 x,重复上述步骤,直至两者相符,此 x, y 即是该精馏

过程的拐点(x_g, y_g)。

3.1.6 由式(11)即可求得最小回流比。

3.2 最小理论板数的计算

全回流的操作线方程为:

$$y_{n+1} = x_n \dots\dots\dots (16)$$

全回流操作时所需的理论板数即是最小理论板数, 记为 N_{min} 。 N_{min} 用样条插值法逐板计算求得, 交替使用相平衡方程和全回流操作线方程(16), 直至 $x_n < x_w$, 使用相平衡方程的次数就是最小理论板数 N_{min} 。

3.3 回流比的选择

回流比的选择实质上是精馏过程的优化问题, 应通过经济核算来确定, 力求使操作费和设备折旧费之和为最低, 如图4所示:

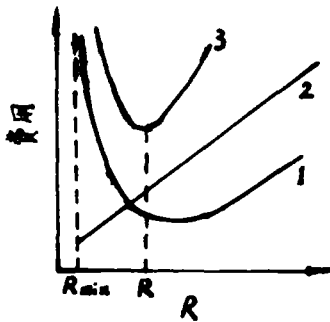


图4 适宜回流比的确定

1—设备费用; 2—操作费用; 3—总费用

通常凭经验取为:

$$R = (1.1 \sim 2)R_{min} \dots\dots\dots (17)$$

潘鸿^[7]对精馏的优化设计进行了有益的讨论, 建议用单纯形法进行优化计算。

若由于条件所限, 可取相对最优回流比使函数 $N(R+1)$ 为最小来确定回流比:

3.3.1 先选择若干个 R 值

3.3.2 用吉利兰图示关系求出 N

为了计算方便, 用 Lidde^[8] 回归的吉利兰关联式:

$$y = 0.545827 - 0.591422X + 0.002743 \frac{1}{X} \dots\dots\dots (18)$$

$$\text{式中: } x = \frac{R - R_{min}}{R + 1}$$

$$y = \frac{N - N_{min}}{N + 2}$$

可算出与一系列 R 对应的 N 值, 于是得到:

$$N(R+1) = f(R) \dots\dots\dots (19)$$

如图5所示:

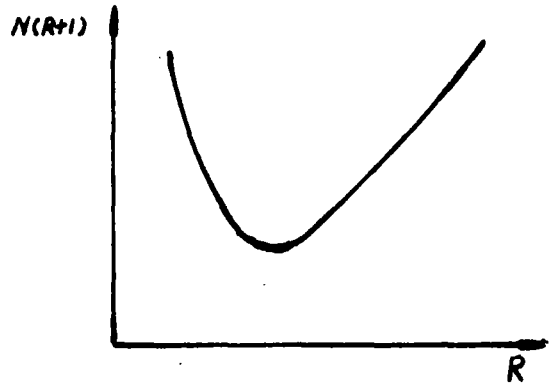


图5 适宜回流比的确定

适宜回流比的必要条件是:

$$\frac{\partial [N(R+1)]}{\partial R} = 0 \dots\dots\dots (20)$$

再验证 $\frac{\partial^2 [N(R+1)]}{\partial R^2}$ 值为正, 确认该 R 值为极小值。

这个求解过程在计算机上是很容易完成的。

3.4 理论板数和各板上的汽液相浓度的求取

$$y_1 = x_D \xrightarrow{\text{相平衡方程}} x_1 \xrightarrow{\text{精馏段操作线方程}} y_2$$

$$\xrightarrow{\text{相平衡方程}} x_2 \dots\dots\dots \rightarrow x_n < x_f$$

n 即精馏段理论板数。

$$x'_n = x_n \xrightarrow{\text{提馏段操作方程}} y'_1 \xrightarrow{\text{相平衡方程}} x'_2$$

$$\xrightarrow{\text{提馏段操作线方程}} y'_2 \dots\dots\dots \rightarrow x'_m < x_w$$

m 即提馏段理论板数。

全塔所需理论板数:

$$N = n + m \dots\dots\dots (21)$$

4 程序框图, 见图 6, 图 7

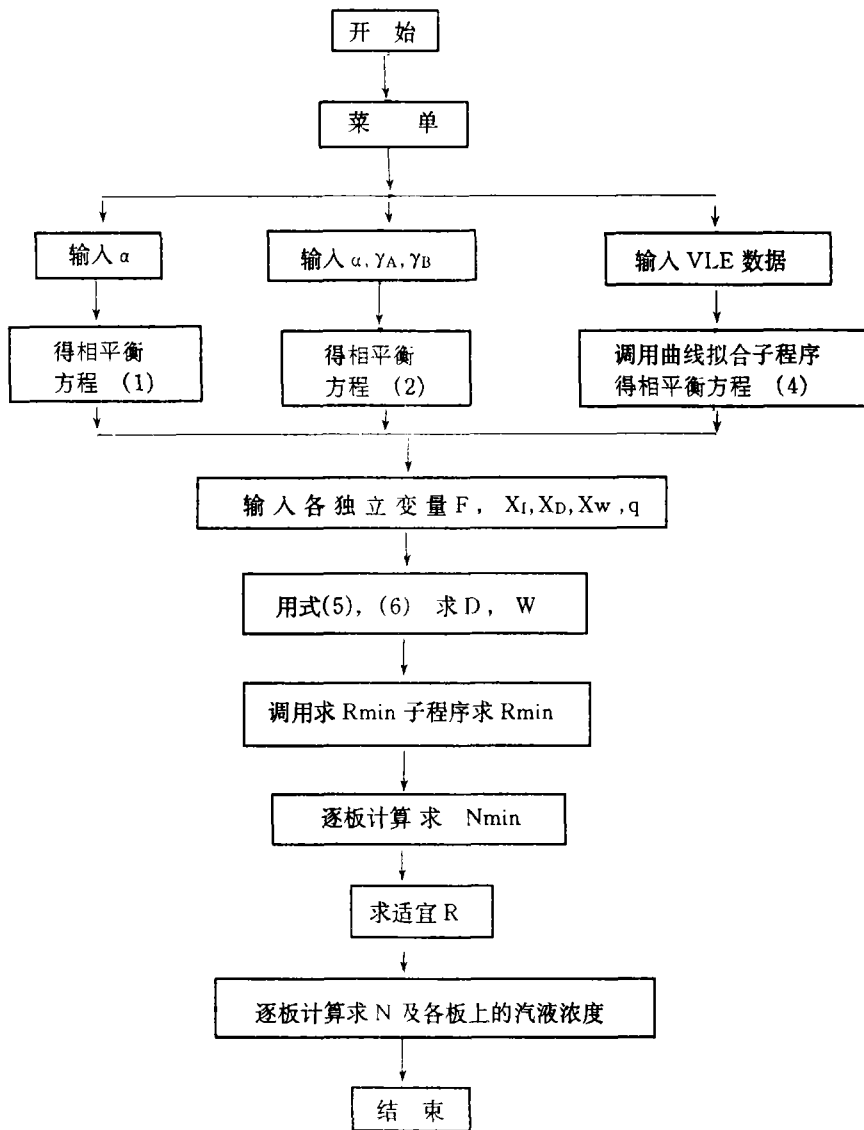


图 6 主程序框图

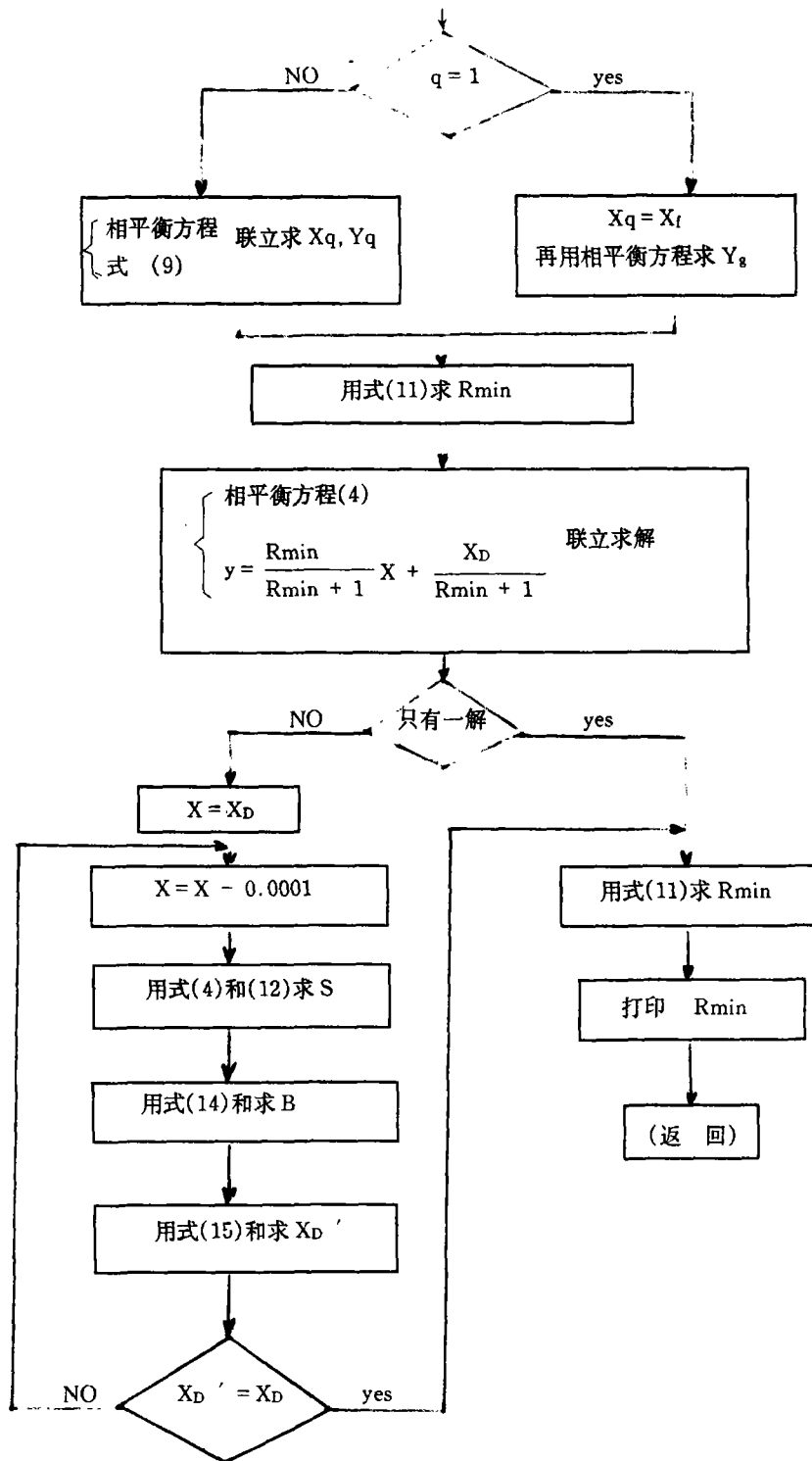


图7 求 R_{min} 子程序框图

5 算例

乙醇和水溶液的精馏, $X_f = 0.4$, $X_D = 0.8$
 $X_w = 0.005$, $g = 1$, 求 R_{min} , N_0 。

由^[9]平衡数据在 $X = 0.16$ 和 $X = 0.8941$
 之间拟合的相平衡方程为:

$$Y = 0.3715066 + 1.1349847X - 2.0369235X^2 + 1.4585378X^3 + 1.6153973X^4 - 2.3878934X^5 + 0.8314363X^6$$

计算得到:

$$\text{挟点: } X_g = 0.6150, \quad Y_g = 0.7044$$

$$R_{min} = 1.0766$$

$$N_{min} = 7$$

$$\text{适宜回流比 } R_{opt} = 1.6687$$

各板上的汽液浓度:

$X_1 = 0.7709$	$Y_1 = 0.8$
$X_2 = 0.7442$	$Y_2 = 0.7818$
$X_3 = 0.7170$	$Y_3 = 0.7650$
$X_4 = 0.6910$	$Y_4 = 0.7481$
$X_5 = 0.6650$	$Y_5 = 0.7318$
$X_6 = 0.6329$	$Y_6 = 0.0.7156$
$X_7 = 0.5949$	$Y_7 = 0.6955$
$X_8 = 0.5477$	$Y_8 = 0.6717$
$X_9 = 0.4777$	$Y_9 = 0.0.6422$
$X_{10} = 0.3587$	$Y_{10} = 0.5984$
$X_{11} = 0.1452$	$Y_{11} = 0.4930$
$X_{12} = 0.0222$	$Y_{12} = 0.1984$
$X_{13} = 0.0024$	$Y_{13} = 0.0287$

全塔理论板层数: $N = 13$ (包括塔釜在内)
 加料板: $N = 10$

符号说明

英文字母

Λ —关于平衡曲线的 n 次多项式回归系数

B—平衡曲线切线的截距

D—馏出物流量 kmol/s

F—进料量 kmol/s

i —平衡曲线回归多项式的幂次

k—实际回流比是最小回流比的倍数

L—液相流量 kmol/s

m—精馏段的理论板数

N—全塔理论板数

n—提馏段的理论板数

g—进料的热状态参数

R—实际回流比

R_{min} —最小回流比

S—相平衡线的斜率

V—蒸汽流量 kmol/s

x—液相中易挥发组分的摩尔分数

y—蒸汽中易挥发组分的摩尔分数

W—釜液流量 kmol/s

希腊字母

α —相对挥发度

γ —活度系数

下标

D—馏出物

F—进料

i —变量

m—提馏段的理论板序号

n—精馏段的理论板序号

g—挟点

w—釜流

参考文献

- 1 刘道德、尹文送. 化学工程. [4], 20(1986)
- 2 王闻天. 化学工程. [5], 31(1986)
- 3 杨进郎、林让仪. 福建化工. [2], 51(1987)
- 4 陈昭球. 化学工程. [2], 74(1990)
- 5 天津大学编. 化工原理(下册). 天津科学技术出版社(1992)
- 6 Arnold V E. Chemical Engineering, 1985; 92(3): 59—62
- 7 潘瑞. 化学工程. [3], 25(1984)
- 8 Liddle. G. L., Chem. Eng., Vol 75, No22, Oct. 21 1968, P137
- 9 李鹤廷等编著. 合成乙醇. 化学工业出版社, 北京(1985)