

МОДЕЛЮВАННЯ ТА ОПТИМІЗАЦІЯ РОБОТИ РЕКТИФІКАЦІЙНОЇ КОЛОНИ ДЛЯ ОТРИМАННЯ 97 % ПРОПІЛЕНУ

© Гузьова І. О., 2018

Розглянуто моделювання в універсальній моделювальній програмі ChemCad ректифікаційної установки для розділення бінарної суміші “пропілен – пропан”. Отримано в табличній та графічній формах характеристики потоків та технологічні параметри колони. Отримано конструктивні характеристики як колони загалом, так і її елементів. У грошовому еквіваленті розраховано ціну обладнання. Розв’язано задачу оптимізації максимізацією продуктивності колони за дистилатом. У результаті оптимізації вихід товарного пропілену збільшився на 138,78 кг/годину. Розрахований критерій оптимізації дорівнює 97 %. Отримано в табличній та графічній формі всі характеристики колони, яка працює в оптимальному режимі.

Ключові слова: ректифікація, модель Соаве–Редліх–Квонг, ChemCad, моделювання, оптимізація, критерій оптимізації.

I. O. Huzova

SIMULATION AND OPTIMIZATION OF THE DISTILLATION COLUMN TO PRODUCE 97 % PROPYLENE

© Huzova I. O., 2018

The article is devoted to modeling the rectification unit for the separation of the propylene-propane mixture is modeling. Flow characteristics and technological parameters of the column are obtained. The structural characteristics of the column and its elements are modeled. The price of equipment is calculated in money terms. The optimization problem is solved. Maximization of column productivity by distillate is modeled. The increase in the yield of commodity propylene at 138.78 kg/h is the result of optimization. The calculated optimization criterion is 97 %. The characteristics of the optimized column are obtained in graphical and tabular form.

Key words: rectification, Soave-Redlich-Kwongmodel, ChemCad, modeling, optimization, optimization criterion.

Постановка проблеми. Область використання пропілену в нафтохімічних процесах виробництва цінних хімічних продуктів велика і продовжує розширюватися. В останні роки зросло використання пропілену нафтових газів для отримання синтетичних мийних засобів.

Близько 90 % споживаного пропілену використовують у виробництві паливних продуктів (процеси алкілування для отримання високооктанового автомобільного бензину і полімеризації - авіаційного бензину), але розміри споживання пропілену для потреб хімії мають тенденцію до збільшення.

Пропілен, як відомо, одержують шляхом ректифікації. В хімічній технології процеси ректифікації за енергоспоживанням є надзвичайно неекономічними. Тому створення оптимальних умов перебігу процесу і підвищення ефективності розділення бінарних сумішей є актуальним завданням.

Аналіз останніх досліджень і публікацій. Останнім часом дослідники все частіше розглядають динаміку процесу ректифікації [1, 2] для вирішення завдань керування.

Однак велике практичне значення як для завдань керування, так і для завдань проектування мають статичні моделі. Методи розрахунків статичних режимів ректифікаційних колон поділяють на проектні й перевіркові. За першими потрібно визначити кількість тарілок при заданих обмеженнях на якість одержуваних продуктів, за другими – вміст продуктових потоків за заданої кількості тарілок.

Більшість відомих методів належать до розряду перевіркових – це різні модифікації методик Льюїса–Матесона і Тиле–Геддеса [3].

Для того, щоб вирішувати завдання проектування за цими методами, потрібно вводити ітераційний пошук за загальною кількістю тарілок колони. При цьому реалізація такого пошуку нерідко утруднена через недостатню стійкість обчислювальних алгоритмів [3]. Так само слід зазначити, що за поширеності перевіркових методів жоден проектний метод не знайшов загального визнання [3].

У роботах [4–6] розглянуто теоретичні основи й принципи побудови нового класу систем керування розподіленими об'єктами з використанням рухливих керівних впливів. Як такі впливи можуть розглядатися окремо, попарно або в сукупності інтенсивність, форма й закон руху в просторі джерел речовини й/або енергії [4, 5]. Поява нового ступеня свободи – можливості вибору закону руху матеріального або енергетичного джерела – дає змогу переводити розподілений об'єкт у стани, недосяжні в класі нерухливих керівних впливів [6].

Питання розподіленого керування процесом ректифікації розглянуто в роботах [6, 7]. Результати досліджень, наведені в цих працях, отримано з використанням математичної моделі процесу, адаптованої для вирішення завдань розподіленого керування, однак має все-таки такі істотні недоліки:

1) для розрахунків рівноважної парової фази використовують поліном високого порядку з постійними коефіцієнтами. Точність такої апроксимації для неідеальних сумішей у край низька. При цьому не враховують фактори, що впливають на форму й положення рівноважної й температурних кривих. У зв'язку із цим виникає необхідність відходу від експериментальних даних до методів, в основу яких покладено закономірності, що випливають із теорії розчинів [8, 9].

2) не враховано тиску у ректифікаційній колоні, величина якого впливає на концентраційні й температурні профілі установки [10].

Зазначені недоліки знижують ефективність розподіленого керування процесом ректифікації на основі адаптованої математичної моделі й повинні бути усунуті.

Для вирішення цієї проблеми необхідно застосувати модуль оптимізації режиму роботи ректифікаційної колони в ChemCad. Для розрахунків рівноважного стану системи, ентальпії, констант фазової рівноваги, термодинамічних властивостей в універсальній моделюючій системі ChemCad існують моделі, які чудово себе зарекомендували для широкого спектра вуглеводнів, а також широкого діапазону температур та тисків [10, 11].

Мета роботи. Метою роботи є підвищення ефективності розподіленого керування процесом ректифікації завдяки удосконаленню використовуваного розрахунку модуля ректифікації (Rigorous distillation column (SCDS)) із застосуванням задачі оптимізації.

Для досягнення мети необхідно вирішити такі завдання:

– розробити алгоритм розрахунку та вибрати математичну модель для розрахунку ректифікаційної колони розділення бінарної суміші пропілен – пропан за відсутності експериментальних даних бінарних пар;

– дослідити ефективність інтеграції вибраної моделі в математичний опис ректифікаційної колони на прикладі установки для розділення суміші “пропілен – пропан”;

– за результатами моделювання в спеціалізованому програмному середовищі ChemCad процесу розділення бінарної суміші “пропілен – пропан” підвищити ефективність розділення бінарних сумішей розв'язанням задачі оптимізації.

Виклад основного матеріалу і обговорення результатів. Для моделювання ректифікаційної колони вибрано модуль *Rigorousdistillationcolumn* (SCDS). Він є модулем точного розрахунку багатоступінчастої рівноваги пара – рідина та моделює розрахунок будь-якої одиничної колони (ректифікаційні колони, дистилятори, абсорбери, стрипинги). Має можливість задати ефективність за Мерфі контактного пристрою. Модуль, де можуть бути змодельовані бокові теплообмінники та бокові погони колон. Модуль, де максимальна кількість вхідних потоків – п'ять, вихідних – чотири. Моделювання колони для розділення бінарної суміші дає суперточні результати.

Модуль *Rigorousdistillationcolumn* (SCDS) для розділення бінарної суміші пропілен – пропан зображено на рис. 1.

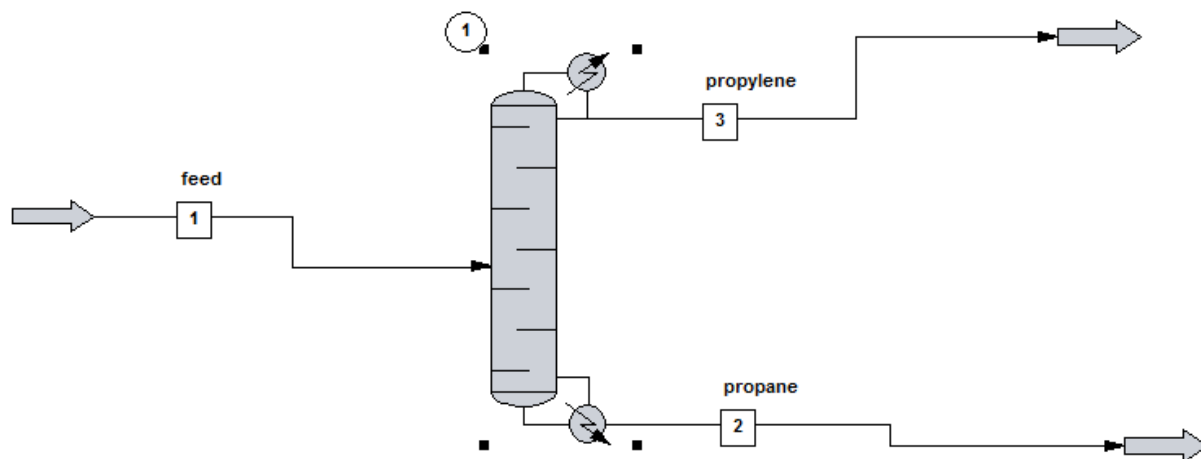


Рис. 1. Модуль *Rigorousdistillationcolumn* (SCDS) для розділення бінарної суміші пропілен – пропан

[1] – потік живлення; [2] – потік кубового залишку; [3] – потік дистиляту; ① – ректифікаційна колона

Пропілен і пропан є одними з легких компонентів, вироблених термічним і каталітичним крекінгом важких нафтових фракцій. Запропоновано розробку ректифікаційної колони для відділення пропілену і пропану із суміші за таких умов: вихідна суміш має процентний склад: 35 % пропілену та пропану відповідно. Температура = 325 K; тиск = 2027 кПа; витрата живлення = 272.2 кмоль/год. Тиск верху та низу колони відповідно 1931 кПа та 2067 кПа. Необхідний вихід пропілену – 97 %.

Для розрахунків рівноважного стану системи, ентальпії, констант фазової рівноваги в універсальній моделюючій системі ChemCad обрано математичну модель SRK (Соаве–Редліх–Квонг).

За цією моделлю можна вирішити багато технологічних проблем, що виникають під час моделювання. Рівняння Soave–Redlich–Kwong дуже ефективне для прогнозування К-значень для вуглеводневих систем за середнього та високого тисків. Хороші результати отримано, використовуючи цей метод для деметанізаторів, деатентаціонерів, депропаніфікаторів, дебутанізаторів, гідрохальних процесів, бінарних вуглеводневих сумішей, а також сумішей, близьких до ідеальних.

Коефіцієнти стиснення та фугитивності суміші для парової та рідкої фаз виведено за рівнянням Soave–Redlich–Kwong. Параметри двійкової взаємодії включено для декількох вуглеводнів та несконденсованих газів. Експериментальні дані зазвичай не потрібні для цього методу. Проте параметри двійкової взаємодії можна змінити або надати після редагування їх у базах даних ChemCad.

Основне рівняння моделі SRK, яке застосовують для розрахунків у ChemCAD [12, 13]:

Стандартна форма:

$$p = \frac{R \cdot T}{V - b} - \frac{a \cdot \alpha}{V \cdot (V + b)},$$

де α – альфа-функція; p – тиск, Па; R – універсальна газова стала, Дж/(моль · К); T – абсолютна температура, К; V – мольний об'єм, м³/моль; a , b – константи, що залежать від конкретної величини.

Кубічна форма:

$$z^3 - z^2 + (A - B - B^2) \cdot z - A \cdot B = 0.$$

Значення параметрів:

$$z = \frac{p \cdot V}{R \cdot T}, \quad a = 0.42747 \cdot R^2 \cdot \frac{T_k^2}{p_k}, \quad b = 0.08664 \cdot R \cdot \frac{T_k}{p_k}$$

$$\alpha = \left[1 + (0.48508 + 1.55171 \cdot \omega - 0.15613 \cdot \omega^2) \cdot \left(1 - \left(\frac{T_k}{p_k} \right)^{0.5} \right) \right]^2$$

$$A = a \cdot \alpha \cdot \frac{p}{R^2 \cdot T^2}, \quad B = b \cdot \frac{p}{R \cdot T},$$

де T_k – критична температура, К; p_k – критичний тиск, Па; ω – фактор ацентричності Пітцера [14].

Альфа-функція, що використовується в моделі SRK, дає нереалістичні результати для вуглеводнів за високих і знижених температур [12]. Модель є надзвичайно точною для визначення параметрів фазової рівноваги “пара – рідина”, а також поправок до ентальпії на тиск [14].

На основі моделі Соаве–Редліх–Квонг в універсальній моделюючій системі ChemCAD побудовано діаграму фазової рівноваги “пара – рідина” для пропілену (рис. 2) та діаграму залежності температури кипіння і конденсації пропілену від складу фаз (рис. 3).

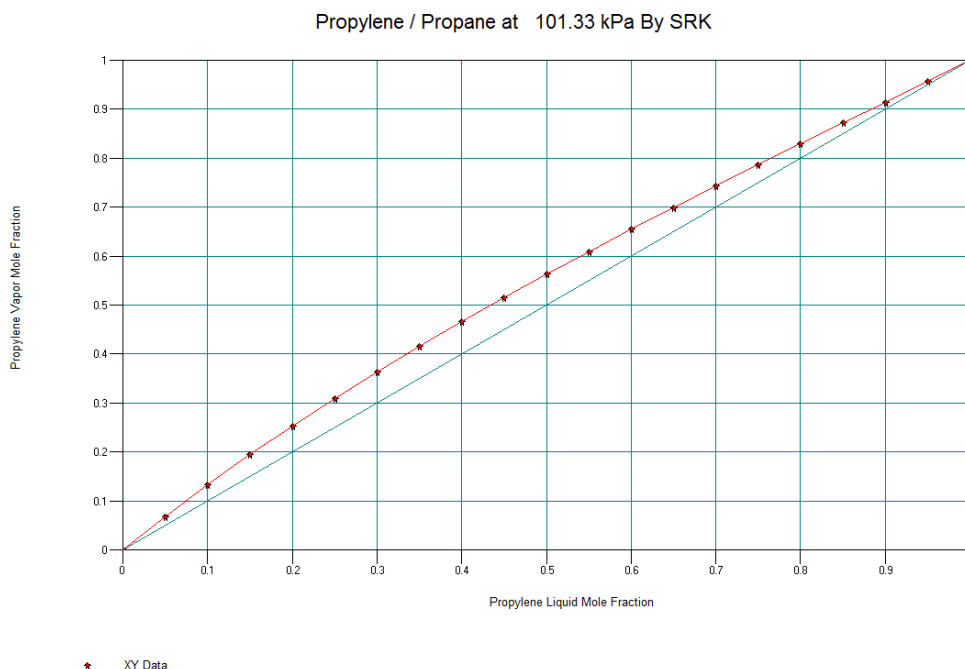


Рис. 2. Діаграма фазової рівноваги “пара – рідина” для пропілену

Результати моделювання ректифікаційної колони для розділення бінарної суміші “пропілен – пропан” наведено в табл. 1.

Таблиця 1

Результати моделювання ректифікаційної колони

Параметр	Од. вим	Значення
Концентрація дистилляту наверху колони	мас. ч.	0,97
Конц. кубового залишку наверху колони	мас. ч.	0.03
Різниця тисків у колоні	кПа	136
Встановлена витрата дистилляту	кмоль/год	88.9044
Встановлена витрата флегми	кмоль/год	3241.9888
Встановлена температура верху колони	К	319.4760
Встановлена температура низу колони	К	330.8744
Тиск наверху колони	кПа	1931.0000

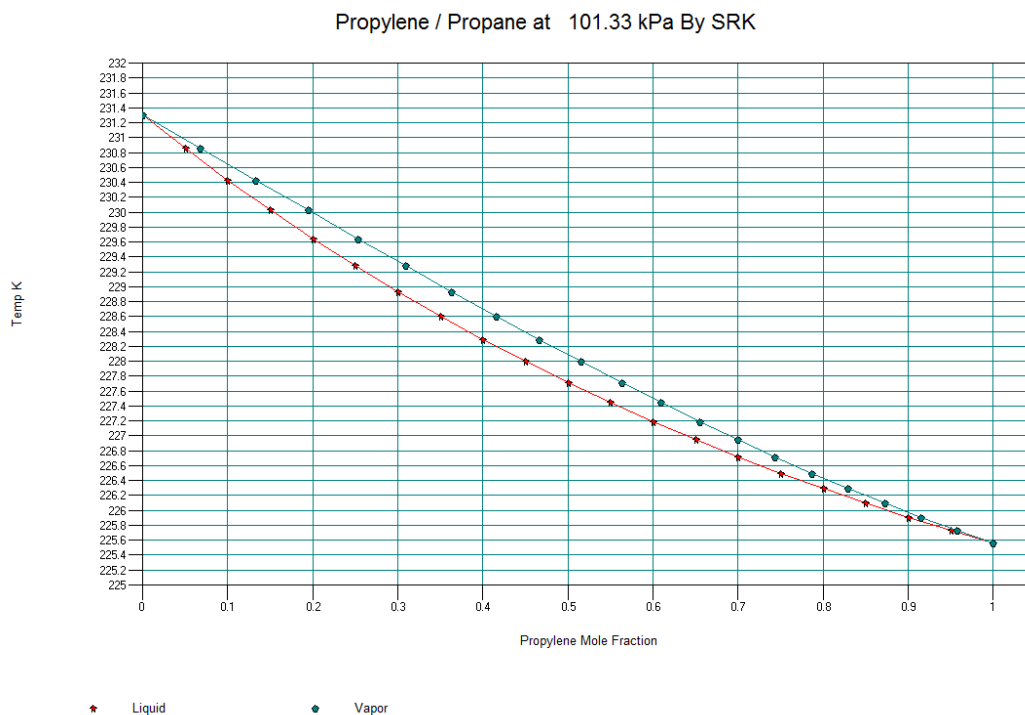


Рис. 3. Діаграма залежності температури кипіння і конденсації пропілену від складу фаз

З метою максимізації виходу готового продукту розв'яжемо задачу оптимізації для визначення оптимального режиму роботи ректифікаційної установки загалом.

Для цього необхідно сформулювати критерій оптимізації. На рис. 4 наведено технологічну схему оптимізації модулю Rigorousdistillationcolumn (SCDS) для розділення бінарної суміші “пропілен – пропан”. Оптимізацію проводять за модулем VisualBasic.

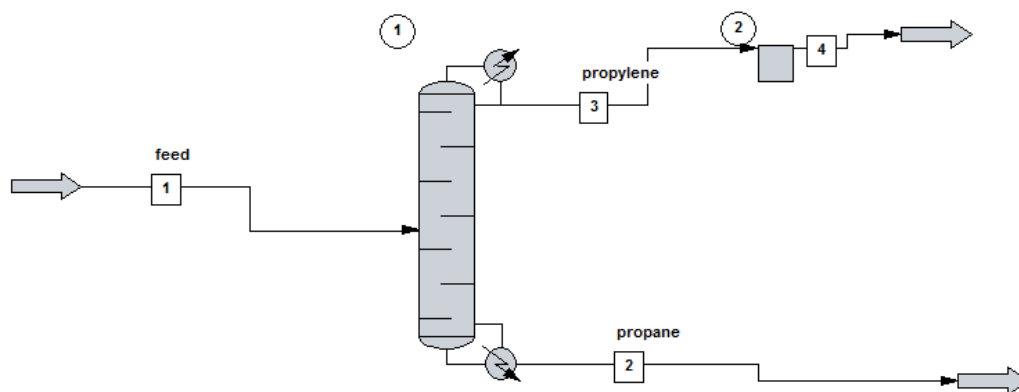


Рис. 4. Технологічна схема оптимізації модулю Rigorousdistillationcolumn (SCDS) для розділення бінарної суміші пропілен – пропан:

1 – потік живлення; **2** – потік кубового залишку; **3** – потік дистиляту; **4** – потік дистиляту після оптимізації; **1** – ректифікаційна колона; **2** – модуль VisualBasic

Сформулюємо критерій оптимізації, обмеження, виберемо пошукові (незалежні змінні).

За умов незмінних змодельованих параметрів максимізуємо продуктивність установки за дистилятом (потік 3).

$$\max_u G_D$$

Пошукові змінні (***u***):

G_w – витрата кубового залишку, кг/год

R – флегмове число.

На пошукові змінні накладемо обмеження, враховуючи результати моделювання (табл. 1)

$$3000 \leq G_w \leq 10000$$

$$1 \leq R \leq 40$$

Крім цього, накладемо обмеження на якість пропілену у верхньому продукті, враховуючи вихідні дані

$$x_D^3 = 0.97$$

Параметри, отримані в результаті розв'язання задачі оптимізації, наведено в табл. 2, 3.

Таблиця 2

Розраховані параметри в результаті розв'язання задачі оптимізації

Параметр	Од. вим	Значення
Розрахована витрата теплоти в дистилаті	МДж/год	29534.7773
Розрахована витрата теплоти в кубі	МДж/год	29610.8418
Розрахована мольна витрата флегми	кмоль/год	2338.0830
Розраховане флегмове число	кг _ф /кг _д	25.3596
Розрахована масова витрата флегми	кг/год	98553.7656
Розрахована масова витрата дистилату	кг/год	3886,2362
Розрахована масова витрата кубового залишку	кг/год	7924.7268
Кількість тарілок	шт	120
Тарілка живлення	–	60
Розрахований діаметр	м	2.8956
Відстань між тарілками	м	0.6096
Висота колони	м	74.0000
Товщина настилу тарілки верхньої частини колони	м	0.0381
Товщина настилу тарілки нижньої частини колони	м	0.0540
Проектний тиск настилу	кПа	94458
Допуск на корозію настилу	м	0,00078
Ефективність настилу	%	85
Кількість теоретичних тарілок	шт	112.0000
Концентрація дистилату вверху колони	мас. ч.	0,967
Конц. кубового залишку вверху колони	мас. ч.	0.033
Площа отворів/Активна площа	м ² /м ²	0,19
Висота перетоку	м	0,0508
Процент захливання	%	80
Системний фактор	–	1
Зазор зливного патрубку	м	0,04
Вартість колони	\$	1378982
Вартість встановлення колони	\$	4136945
Маса обичайки	кг	256607
Ціна обичайки	\$	795433
Ціна всіх тарілок	\$	219609
Ціна площадки для обслуговування	\$	69603
Тип клапана	–	тип клапану V1[11]
Матеріал клапана	–	Вуглецева сталь (S. S.)
Матеріал колони	–	Вуглецева сталь (S. S.)

Таблиця 3

Матеріальний та тепловий баланс

Матеріальний баланс	кмоль/год		кг/год	
	вхід	вихід	вхід	вихід
пропан	176.930	176.930	7801.906	7801.906
пропілен	95.270	95.270	4009.057	4009.057
Загалом	272.200	272.200	11810.963	11810.963
Тепловий баланс	МДж/год			
	вхід		вихід	
Вхідні потоки	-19999.6			
Вихідні потоки			-19923.7	
Загальна кількість поглинутої теплоти	29610.8			
Загальна кількість виділеного тепла	-29534.8			
Загалом	-19923.5		-19923.7	

У результаті оптимізації, як видно з табл. 4, вихід готового продукту з концентрацією пропілену 0,97 збільшився на 138,78 кг/год. Критерій оптимізації становить 97 %.

Таблиця 4

Параметри, що змінилися в результаті оптимізації

Параметри	Значення отриманих параметрів				Ефект	
	у результаті моделювання		у результаті розв’язання задачі оптимізації			
	кмоль/год	кг/год	кмоль/год	кг/год	кг/год	%
витрата дистиляту	88.9044	3747,46	92.1968	3886,2363	+138,78	5
витрата флегми	3241.9888	136654.774	2338.0830	98553.7656	−38101.008	28
Флегмове число	36,466		25.3596		—	—

Висновки. Змодельовано з використанням математичної моделі Соаве-Редліх-Квонг за універсальною моделювальною програмою ChemCad ректифікаційну установку для розділення бінарної суміші “пропілен – пропан”. Розв'язано задачу оптимізації максимізацією продуктивності колони за дистилятом. У результаті оптимізації вихід товарного пропілену збільшився на 138,78 кг/годину. Розраховано критерій оптимізації, що дорівнює 97 %. Отримано в табличній та графічній формах усі характеристики колони (технологічні, конструктивні, механічні, економічні), яка працює в оптимальному режимі.

1. Софиева Ю. Н., Абрамов К. В. Применение пакета моделирующих программ ChemCAD в учебно-тренировочных комплексах для изучения систем автоматизации ректификационных установок // Инженерный вестник Дона, 2012, № 1 URL: ivdon.ru/magazine/archive/n1y2012/619.
2. Абрамов К. В. Методика определения коэффициентов ПИД-контроллера при моделировании автоматизированных систем управления ректификационной колонной с применением пакета ChemCAD // Инженерный вестник Дона, 2011, № 2 URL: ivdon.ru/magazine/archive/n2y2011/444.
3. Волков Д. Н., Вилков Г. Г. Проектирование сложных ректификационных колонн на основе энтропийного метода моделирования. Инженерный вестник Дона, № 1 (2015) ivdon.ru/magazine/archive/n1y2015/2748.
4. Волков Д. Н., Вилков Г. Г. Энтропийное моделирование сложных ректификационных колонн // Научно-технический вестник Поволжья. – 2013. – № 5. – С. 134–139.
5. Рапопорт Э. Я. Анализ и синтез систем автоматического управления с распределенными параметрами: учеб. пособие / Э. Я. Рапопорт. – М.: Высш. шк., 2005. – 292 с.
6. Белоброва Е. В. Автоматическое управление тепломассообменными процессами с подвижными распределенными регулирующими воздействиями / Е. В. Белоброва, А. Р. Шейкус, В. И. Корсун //

Восточно-Европейский журнал передовых технологий. – 2014. – № 5/2 (71). – С. 51–55.

7. Левчук И. Л. Способ управления процессом ректификации с помощью распределенных управляющих воздействий / И. Л. Левчук, А. Р. Шейкус, В. Я. Тришкин // *Вісник НТУ “ХПІ”. Серія: Нові рішення в сучасних технологіях.* – 2015. – № 14 (1123). – С. 100–105.

8. Комиссаров Ю. А. Математическое моделирование при расчете парожидкостного равновесия многокомпонентных систем / Ю. А. Комиссаров, Дам КуангШанг // *Вестник АГТУ. Серия: Управление, вычислительная техника и информатика.* – 2011. – № 1. – С. 43–50.

9. Тархов К. Ю. Особенности влияния относительной летучести компонентов на расчет и структуру диаграмм фазового равновесия жидкость-пар многокомпонентных смесей / К. Ю. Тархов, Л. А. Серафимов, А. М. Андреева // *Вестник МИТХТ.* – 2011. – Т. 6. – № 1. – С. 61–73.

10. Шейкус А. Р., Левчук И. Л., Тришкин В. Я., Корсун В. И. Моделирование парожидкостного равновесия при подвижном управлении процессами ректификации // *Вісник Нац. техн. ун-ту “ХПІ”.* – 2016. – № 44 (1216). – С. 87–100.

11. Математическое моделирование химико-технологических систем с использованием программы ChemCad: учебно-методическое пособие / Казан. гос. технол. ун-т. Сост.: Н. Н. Зиятдинов, Т. В. Лантева, Д. А. Рыжов. – Казань, 2008. – 160 с.

12. Neau E. The Soave, Twu and Boston–Mathiasalpha functions in cubic equations of state. P. II. Modeling of thermodynamic properties of pure compounds / E. Neau, O. Hernandez-Garduza // *Fluid phase equilibria.* – 2009. – Vol. 276. – P. 156–164.

13. Lemmon E. W. NIST standard reference database23: reference fluid thermodynamic and transport properties – REFPROP, Version 9.1: standard reference data program / E. W. Lemmon, M. L. Huber, M. O. McLinden; National Institute of Standards and Technology. – Gaithersburg, 2013.

14. Герасимов А. А., Александров И. С., Григорьев Б. А., Люгай Д. В. Математическое моделирование пластовых систем, уравнения состояния и фазовые равновесия пластовых флюидов и их компонентов // *Научно-технический сборник “Вести газовой науки. Актуальные вопросы исследований пластовых систем месторождений углеводородов”.* – 2015. – № 4 (24). – С. 5–13.