

利用微机计算多组份精馏塔的理论板数

游 锦 鲜

(化工与生化工程系)

摘 要

本文给出逐板法计算理论板数的BASIC程序,特点是考虑了温度和作为设计变量的板压降对相平衡常数的影响,程序中用的收敛语句大为简化,并有加速收敛措施,适合于Apple机直接使用。

化学工程利用电子计算机辅助设计在近二十多年来发展迅速^[1]。尤其是微机大量投放市场后,因其价格便宜,使用方便,容易普及,在数据处理和辅助设计方面应用很广泛。

多组份精馏塔理论板数的严格计算通常用FORTRAN或ALGOL语言在大型或中小型计算机上进行。本文作者对苯、甲苯、二甲苯等七个组份按理想体系处理,根据逐板法原理^[2],以BASIC语言编写源程序,利用微型机进行严格计算。

逐板法基于恒摩尔流的假定,对精馏段和提馏段均反复交替运用相平衡方程和操作线方程进行计算。精馏段相平衡方程

$$X_i = Y_i / K_i \quad (1)$$

该方程必须满足组份归一方程

$$\sum_{i=1}^M X_i = 1 \quad (2)$$

精馏段操作线方程

$$Y_{(n+1),i} = \frac{R}{R+1} X_{n,i} + \frac{X_{D,i}}{R+1} \quad (3)$$

提馏段相平衡方程

$$Y_i = K_i \cdot X_i \quad (4)$$

且应满足

$$\sum_{i=1}^M Y_i = 1 \quad (5)$$

提馏段操作线方程

$$X'_{(n+1),i} = \frac{R \cdot D + Q \cdot F - W}{R \cdot D + Q \cdot F} Y'_{n,i} + \frac{W}{R \cdot D + Q \cdot F} X'_{B,i} \quad (6)$$

本文1987年10月13日收到。

式(1)和(4)中相平衡常数 K_i 是温度、压力和组成的函数,对理想体系,可由Antoine公式和总压求得:

$$P_i^s = \exp[A_i - B_i/(T + C_i)] \quad (7)$$

$$K_i = P_i^s/P \quad (8)$$

K_i 与 T 是非线性关系,选定的 T 应满足组份归一方程(2)和(5),可用弦位法或牛顿法求解。

弦位法^[3]求露点,联立式(7)、(8)、(1)和(2),令 $S = 1 - \sum X_i$, S 为温度 T 的函数,即 $S(T) = 0$, S 对 T 求一阶导数 $S'(T)$ 和二阶导数 $S''(T)$,由于 $S'(T) > 0$, $S''(T) < 0$,所以 $S(T)$ 具有图1中的曲线,

求根公式如下:

$$T_n = T_{n-1} - \frac{(T_2 - T_{n-1}) \cdot S(T_{n-1})}{S(T_2) - S(T_{n-1})} \quad (9)$$

弦位法求泡点,则联立式(7)、(8)、(4)和(5),令 $S = 1 - \sum Y_i$,因 $S' < 0$, $S'' < 0$,所以曲线如图2所示,按图中给的参数,也可用式(9)求 $S = 0$ 的根。

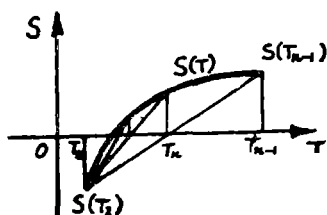


图 1

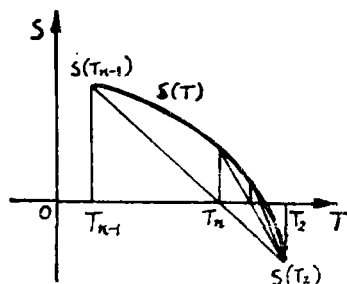


图 2

用微机计算泡点和露点温度、最小理论板数、塔底塔顶各组份的分布、最小回流比、以及吉利兰关联法是很方便的。对理想体系,用牛顿法和弦位法求泡、露点温度均可获得满意的结果。牛顿法收敛快,但求最小回流比时,牛顿法不如弦位法,因为该法可能收敛于非需要的根,所以常用弦位法求回流比、以及泡点和露点温度。

Lewis逐板法是严格计算方法之一,可以作为三对角矩阵法计算的基础,常被采用,

Lewis计算框图特点是平衡常数 $K_i = \alpha_i \sum_{j=1}^M Y_j / \alpha_j$,既包含了组分归一方程,又消掉了各板压降

的影响,温度对 α_i 的影响采用塔顶塔底和进料三点温度下的 α_i 的几何平均值校正。显然,当温度对 α_i 影响不大时,这样处理是恰当的。该框图不用其它收敛法,直接求解。本文框图考虑了板压降和温度对平衡常数 K_i 的影响,板压降作为设计变量处理,可以按需要给定。精馏段和提馏段可以是不同的板压降。计算理论板数时,通常是精馏段从塔顶往下逐板计算,露点温度逐板升高,给定的顶温初值比纯组份沸点低些,而提馏段往上计算,釜温泡点定得高些,这样赋值,用弦位法计算泡、露点温度,是以图1、2中的点 $S(T_2)$ 为定点作弦求根,所以程序可以大大简化,BASIC语言只占三个语句号。提馏段压降,程序包含了自行调整,使之与精馏段衔接。

还设置了自行调整塔顶组成和塔底组成的语句,使进料板关键组份达到契合要求后输出结果。

计算示例:

已求出如表1组份分布(摩尔分率)

表1

	苯	环己烷	甲苯	邻二甲苯	间二甲苯	对二甲苯	1,3,5三甲苯
塔顶	0.9888	6.638E-3	4.53E-3	6.086E-8	6.135E-7	4.058E-7	1.0E-10
塔底	0.05212	5.177E-4	0.5733	0.07022	0.1691	0.0849	0.0498

产品:塔顶0.7209kmol;塔底0.2791kmol。进料量:1 kmol;进料热状态:泡点进料;回流比: $R=1.2$; $H=1066P_a(8\text{mmHg})$; $PD=1.013\times 10^5P_a(760\text{mmHg})$; $PB=1.33\times 10^5P_a(1000\text{mmHg})$; $TD=353K$; $TB=400K$ 。

在苹果机上输入程序和有关数据后,从开始运算至打印输出结果不到5分钟时间。苹果机以9位精度的数据输出,各板的温度和汽液相组成供参考,其有效数字应按实际条件进行取舍。

结果: $NR=8$, $NT=16$ (各板温度、压力、汽液相组成均略去)。

参 考 文 献

- [1] Richard S.H.Mah, *Foundatons of Computer-aided Chemical Process Design*, N. Y. , Vol.2, (1981)。
- [2] 上海化工学院、天津大学、浙江大学合编,化学工程(第二册) 化工出版社, (1980)。
- [3] 原北京矿业学院高等数学教研组编著,四川矿业学院数学教研组增订,数学手册(增订本),煤炭工业出版社, (1975)。
- [4] 郭天民等著,多元汽液平衡和精馏,化学工业出版社, (1983)。

Calculation on the Theroetical Plate Number of Multi-component Distillation Column by Microcomputer

you Jinxian

For calculating the theoretical plate number of multicomponent distillation column by stepwise method, this paper gives related BASIC program for use in Apple II and other microcomputers.

The program is characterized by considering the effect of temperature and plate pressure drop as design variables on the phase equilibrium; by simplifying convergence statement; as well as by accelorating convergence measures,