

分段函数法逐板计算非理想物系的理论板数^{*}

李泯茜, 邓 春, 曹 睿, 刘梦溪

(中国石油大学(北京)化学工程与环境学院, 北京 102249)

[摘要]运用分段函数法可以逐板计算非理想物系的理论板数:首先对该非理想物系的气液平衡数据进行分段拟合,得到气液相组成之间的分段函数;然后利用逐板计算法求解非理想物系的理论板数。利用 Aspen Plus 中塔的 Radfrac 模块进行严格计算和验证,结果显示,采用分段函数法逐板计算的理论板数为 11.72,严格计算法得到的理论板数为 11,两者非常接近。因此,采用分段函数法逐板计算非理想物系的理论板数是一种正确而有效的方法。

[关键词]非理想物系; 相平衡; 分段函数; 逐板计算

Plate-to-plate Calculation for the Number of Theoretical Plates by Piecewise Function Method for a Nonideal System

Li Minxi, Deng Chun, Cao Rui, Liu Mengxi

(College of Chemical Engineering and Environment, China University of Petroleum, Beijing 102249)

Abstract: A piecewise function method of plate-to-plate calculation for the number of theoretical plates for a nonideal system is introduced in this paper. First, the vapor-liquid equilibrium data of the nonideal system are fitted to obtain the piecewise function between the molar fractions of gas and liquid phases. Next, the number of theoretical plates of the nonideal system is determined by plate-to-plate calculation method. In addition, the rigorous calculation module in Aspen Plus, Radfrac, is used for calculation and verification. Results show that the number of theoretical plates calculated by piecewise function method is 11.72, and the number of theoretical plates obtained by rigorous calculation method is 11, which are very close. It verifies the correctness and applicability of the proposed method in this paper.

Key words: Nonideal system; Phase equilibrium; Piecewise function; Plate-to-plate calculation

[作者简介] 李泯茜(1996-),女,本科生;邓春(1984-),男,副教授,博士,本文共同第一作者。

[通信作者] 邓春, E-mail: chundeng@cup.edu.cn。

^{*} 基金项目:北京高校“优质本科课程”建设项目“化工原理”;中国石油大学(北京)教改项目“化工原理核心课程建设”“化工原理混合式教学课程建设”和“化工系统工程教学内容的革新”。

精馏是化工行业最重要的单元操作之一。在精馏塔的设计过程中,求解理论板数和各层理论板的气液相组成是不可或缺的一部分。对于理想物系,由已知的相对挥发度确定相平衡曲线,进而交替使用相平衡方程与操作线方程,即可得到各层理论板的气液相组成和总理论板数。但是对于非理想物系,由于不同温度和组成下的相对挥发度不可视为常数,通常无法直接得到以平均相对挥发度表示的相平衡关系式,只能利用泡点方程或露点方程试差迭代求解某块理论板上的温度和组成,每块理论板均需反复计算多次。在理论板数不多的情况下,这种计算方法是可行的。但当回流比很小、所需理论板很多时,这种方法将使计算变得烦琐。

计算二元及多元物系精馏分离的理论板数通常可采用逐板计算法、图解法和简捷法等^[1]。对于理想物系,刘玉兰等结合 Excel 中的 IF 函数功能进行逐板计算^[2];曹睿等先后提出指数函数严格算法和指数函数简捷算法^[3-4],将任意两层理论板液相组成之间的非线性关系描述为指数函数,无需进行逐板计算即可得到理论板数;许军等通过数学变换,引入新的变量得到计算理论板数的公式^[5]。时景荣等利用 Excel 及 VBA 编程,实现了图解法计算理想物系和非理想物系的理论板数^[6]。

为了简化并准确求解非理想体系的理论板数,本文以丙酮-水二元物系的精馏分离为例,首先对该非理想物系的多组平衡数据进行分段拟合,得到气液相组成之间的分段函数;然后利用逐板计算法求解该非理想物系的理论板数。之后我们用严格计算法进行验证,证明本文提出的方法是正确的。

一、丙酮-水溶液的精馏分离条件

丙酮-水溶液(丙酮的摩尔分数为 0.5)在 20℃、1atm 下进行精馏分离,泡点进料,进料量为 100kmol/h。分离要求塔顶馏出液中丙酮组成不低于 0.95(摩尔分数,下同),塔釜废水中丙酮含量不高于 0.001。塔顶采用全凝器,冷凝器压力为 90kPa,再沸器压力为 120kPa,回流比为 1.5。

求在此操作条件下的理论板数和各层理论板的气液相组成。流程图如图 1 所示。

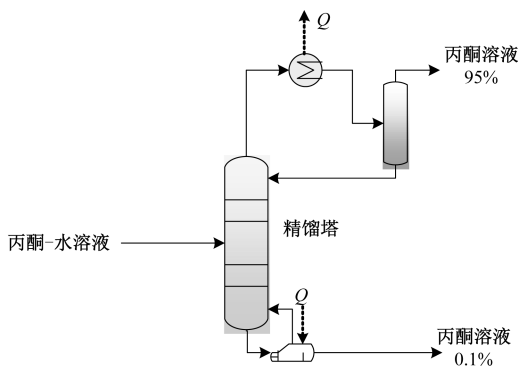


图 1 丙酮-水体系连续分离精馏塔示意图

二、分段函数法逐板计算理论板数

根据已知条件,相关参数为 $x_F = 0.5$, $x_D = 0.95$, $x_W = 0.001$, $q = 1$, $R = 1.5$ 。

精馏段操作线方程:

$$y_{n+1} = \frac{R}{R+1}x_n + \frac{x_D}{R+1} \quad (1)$$

也可表示为

$$x_n = \frac{R+1}{R}y_{n+1} - \frac{x_D}{R} \quad (2)$$

提馏段操作线方程:

$$y_{n+1} = \frac{RD + qF}{(R+1)D - (1-q)F}x_n - \frac{Wx_W}{(R+1)D - (1-q)F}$$

或

$$y_{n+1} = \frac{RD/F + q}{(R+1)D/F - (1-q)}x_n - \frac{Wx_W/F}{(R+1)D/F - (1-q)} \quad (3)$$

也可表示为

$$x_n = \frac{(R+1)D/F - (1-q)}{RD/F + q}y_{n+1} + \frac{Wx_W/F}{RD/F + q} \quad (4)$$

其中, $\frac{D}{F} = \frac{x_F - x_W}{x_D - x_W}$, $\frac{W}{F} = \frac{x_D - x_F}{x_D - x_W}$ 。

带入已知数据,联立式(1)和式(3),即可解得精馏段操作线与提馏段操作线的交点 $x_q = 0.5$, $y_q = 0.68$ 。

利用 Aspen Plus 软件的二元物系分析功能,

选用 NRTL 物性方法,可得到丙酮-水气液相平衡数据,在 Excel 中可以绘制出丙酮-水相平衡曲线,如图 2 所示。

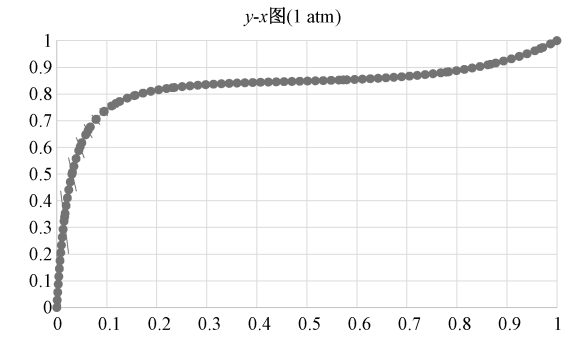


图 2 1atm 条件下丙酮-水气液相平衡图(y-x 图)

函数拟合过程中按照以下原则分段和确定函数形式:1.根据 y 随 x 的变化趋势确定分段区间的大小。变化幅度大的区域,自变量区间应较窄;变化幅度小的区域,自变量区间应较宽。这样能够使拟合程度更好。2.在确保方差 $R^2 \geq 0.999$ 的条件下,拟合多项式的最高次幂不能过大(≥ 5),次幂增大虽然会改善拟合程度,但高次幂的函数波动较大,不符合相平衡曲线相对平滑的特点。

由此,得到分段函数:

$$y = \begin{cases} -16634x^4 + 4590.1x^3 - 494.14x^2 + 27.394x + 0.0118, & 0 \leq x < 0.1 \\ 12.45x^3 - 9.9225x^2 + 2.8102x + 0.5503, & 0.1 \leq x < 0.3 \\ 0.6836x^3 - 0.966x^2 + 0.5131x + 0.7531, & 0.3 \leq x < 0.7 \\ 2.6522x^3 - 5.5086x^2 + 4.0008x - 0.1452, & 0.7 \leq x \leq 1 \end{cases} \quad (5)$$

各个分段函数的方差分别为 $R^2 = 0.999\ 8, R^2 = 0.999\ 6, R^2 = 1, R^2 = 1$ 。这表明用分段函数拟合丙酮-水体系的相平衡数据效果较好。

将已知条件、精馏段和提馏段操作线方程及相平衡分段函数写入 Excel 表格,相平衡分段函数易于表示为气相组成关于液相组成的形式,即运用相平衡方程时需已知液相组成,所以从塔底开始计算, $x_n = x_w = 0.001$ 。运用式(5)由 x_n 计算 y_n ,在 IF 函数中分别输入不同液相分率下气

相分率的计算公式,以便于之后由液相组成计算气相组成时可以直接套用该函数。运用操作线方程由 y_n 计算 x_{n-1} ,当 $x_n \leq x_q$ 时,代入提馏段操作线方程(4)式,反之则带入精馏段操作线方程式(2),同样采用 IF 函数直接拖动鼠标计算。如此,交替使用相平衡方程和操作线方程,直至 $y \geq 0.95$,计算过程如图 3 所示。最终计算得到的理论板数(包括再沸器)为 11.72 块。

xF	xD	xW	R	q	D/F	W/F	xq	yq	
0.5	0.95	0.001	1.5	1	0.526	0.474	0.5	0.68	
精馏段方程		1.667	0.633	x= C3*y-D3					
提馏段方程		0.735	0.000	x= C4*y+D4					
相平衡方程		$-16634x^4 + 4590.1x^3 - 494.14x^2 + 27.394x + 0.0118, \quad 0 \leq x < 0.1$							
		$12.45x^3 - 9.9225x^2 + 2.8102x + 0.5503, \quad 0.1 \leq x < 0.3$							
		$0.6836x^3 - 0.966x^2 + 0.5031x + 0.7531, \quad 0.3 \leq x < 0.7$							
		$2.6522x^3 - 5.5086x^2 + 4.0008x - 0.1452, \quad 0.7 \leq x \leq 1$							
		x	y						
		N	0.0010	0.0387					
		N-1	0.0287	0.4883					
		N-2	0.3591	0.8409					
			0.7681	0.8797					
			0.8329	0.8981					
		*	0.8634	0.9097					
		*	0.8828	0.9184					
		*	0.8973	0.9256					
			0.9093	0.9321					
			0.9202	0.9384					
		2	0.9306	0.9449					
		1	0.9415	0.9520					
								11.72	

图 3 分段函数法逐板计算理论板数

三、利用 Aspen Plus 软件模拟计算理论板数

在 Aspen Plus 中新建一个 bkp 文件,在物性环境下输入组分及物性方法(选择 NRTL),然后进入模拟环境。

首先用简捷精馏模块 DSTWU 初步计算指定回流比下的理论板数。建立模拟流程图,依次输入进料物流参数 $T = 20^\circ\text{C}$, $P = 1\text{atm}$, $F = 100\text{kmol/h}$, $x_F = 0.5$,以及精馏塔模块参数 $R = 1.5$,轻组分回收率 $\frac{Dx_D}{Fx_F} = 0.999\ 1$,重组分回收率 $\frac{D(1-x_D)}{F(1-x_F)} = 0.052\ 58$,冷凝器压力 90kPa,再沸器压力 120kPa。运行模拟软件,计算结果如图 4 所示。

由图 4 可知,简捷法计算的理论板数为 16.92 块,且丙酮-水溶液在第 12.45 块板进料。以此作为参考值,在严格精馏模块 Radfrac 中输入理论板数为 16,根据进料位置与理论板数的比例关系 $12.45/16.93 = 0.74$,设定进料位置在第 12 块板上,运行模拟软件。查看塔顶塔底产品的摩尔分率可知,满足分离要求。逐渐减少理论板数,按照上述方法调整进料位置,依次运行并查看

Summary	Balance	Reflux Ratio Profile	Status
▶ Minimum reflux ratio:	0.199631		
▶ Actual reflux ratio:	1.5		
▶ Minimum number of stages:	13.3458		
▶ Number of actual stages:	16.9271		
▶ Feed stage:	12.4539		
▶ Number of actual stages above feed	11.4539		
▶ Reboiler heating required:	1363.04		kW
▶ Condenser cooling required:	1143.59		kW
▶ Distillate temperature:	52.9311		C
▶ Bottom temperature:	104.035		C
▶ Distillate to feed fraction:	0.52584		

图 4 DSTWU 模块模拟结果

结果。当理论板数降至 10 块时,塔顶产品中丙酮的摩尔分率为 0.949,塔底产品中丙酮的摩尔分率为 0.001 72,刚好不能满足分离要求。因此, Aspen Plus 软件模拟得到的理论板数为 11 块,进料位置为第 9 块理论板,塔顶产品中丙酮的摩尔分率为 0.951,塔底产品中丙酮的摩尔分率为 0.000 023 4,满足分离要求。

四、结论

本文以丙酮-水二元体系精馏分离过程理论板数的计算为例,在 Excel 中利用分段函数拟合非理想体系气液相平衡曲线,并结合逐板计算法求解精馏过程理论板数,结果为 11.72 块,进料位置为第 9.34 块;进而利用商业软件 Aspen Plus 进行模拟计算,得到理论板数为 11 块,进料位置为第 9 块。严格模拟计算结果与分段函数法逐板计算的结果很接近,验证了分段函数拟合法的准确性。该方法有助于学生理解和掌握非理想物系精馏分离的逐板计算法。

符号说明

- x_F —— 进料组成;
- x_D —— 塔顶产品组成;
- x_W —— 塔底产品组成;
- q —— 进料热状况参数;
- R —— 回流比;
- y_{n+1} —— $n+1$ 块板上升的气相组成;
- x_n —— n 块板下降的液相组成;
- F —— 进料的摩尔流率, kmol/h;
- D —— 塔顶产品摩尔流率, kmol/h;
- W —— 塔底产品摩尔流率, kmol/h。

(文字编辑:李丽妍)

参考文献:

[1] 李阳初,刘雪暖. 石油化学工程原理[M]. 北京:中国石化出版社,2008:656.

[2] 刘玉兰, 齐鸣斋, 叶启亮. 运用 Excel 对精馏塔进行逐板计算[J]. 化学工程师,2009,171(11):20-22.

[3] Cao R, Fu G L, Liu Y S, et al. Exponential functional rigorous method for calculation of the number of theoretical plates in distillation column[J]. Chemical Engineering Science,2012,84:628-637.

[4] Cao R, Fu G L, Guo H M. Exponential function shortcut method for the calculation of the number of theoretical plates in a distillation column[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2014, 53 (38): 14830-14840.

[5] 许军, 齐鸣斋, 刘玉兰. 运用 Excel 对精馏塔进行逐板计算和简捷计算[J]. 化工高等教育,2013,30(1):66-70.

[6] 时景荣, 罗传义. 用 Excel 图解法求精馏塔理论塔板数[J]. 计算机与应用化学,2005(7):73-76.