

УДК 66.048

**ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССА
ФРАКЦИОНИРОВАНИЯ МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ СМЕСИ
FRACTIONATION PROCESS SIMULATION SOFTWARE COMPLEX
MULTICOMPONENT MIXTURES**

**Сахабутдинов Г. А., Ямалдинов А. Р., Руднев Н. А.,
Абызгильдин А. Ю.**

**Уфимский государственный нефтяной технический университет,
г. Уфа, Российская Федерация**

G. A. Sahabutdinov, A. R. Jamaldinov, N. A. Rudnev, A. Yu. Abyzgildin

**Ufa State Petroleum Technological University,
Ufa, the Russian Federation**

e-mail: metel1434@yandex.ru

Аннотация. Рассматриваются различные численные методы и проблемы расчёта ректификационных колонн. Решение проблем при переходе от простых колонн к сложным, наличие воды в системе ректификации, расчет с учетом теплового баланса ступени. Рассмотрены различные алгоритмы расчётов и разработан пакет прикладных программ для поверочного и проектного расчёта комплексов колонн, позволяющий определить качественные и количественные показатели продуктов, тепловую нагрузку на оборудование колонн, расход водяного пара, теплофизические характеристики потоков и гидродинамические нагрузки на элементы колонн. Пакет из пяти программ и базы данных реализован на языке Турбо- Паскаль и актуализирован на использование языков – Python и C++.

Расчетный анализ промышленного фракционирующего оборудования позволяет разработать рекомендации по повышению эффективности работы массообменных устройств, увеличению глубины отбора целевых компонентов и фракций, повышению качества продуктов разделения, а также снижению энергетических затрат.

Разработанный пакет программ реализует функции, позволяющие производить различные функции расчёта промышленного оборудования и в диалоговом режиме создавать файл исходных данных и формировать таблицу результатов, позволяющих разработку рекомендаций по снижению затрат, увеличению глубины отбора, повышению качества и энергоэффективности массообменных устройств.

Abstract. Examines different numerical methods and problems of calculation of the rectification columns. The solution of problems in the transition from simple to complex columns, the presence of water in the system of rectification, taking into account the heat balance calculation. Discuss various algorithms of calculations and designed application package for span and design calculation of complexes of columns, to determine the quantity and quality of products, the heat load on the equipment, water vapour consumption thermophysical characteristics of streams and hydrodynamic loads on elements of columns. A pack of five programmes and databases implemented on Turbo Pascal language and updated on the use of languages-Python and c++.

Settlement analysis of industrial fractions equipment allows to develop recommendations for improving the efficiency of mass transfer devices, increasing the depth of selection target components and fractions, improving the quality of the products division, as well as lower energy costs.

Developed software package implements functions that allow various functions for calculating industrial equipment and on-line to create input file and generate a table of results that enable the development of recommendations to reduce the cost, increase the depth of selection, quality and energy efficiency mass exchange devices.

Ключевые слова: алгоритм, программа, ректификация, колонна, углеводороды, водяной пар, теплообмен, массообмен.

Key words: Algorithm, program, rectification, Colonna, hydrocarbons, water vapor, heat transfer, mass exchange.

Расчет процесса фракционирования углеводородных смесей в сложных разделительных системах с многообразными связями паровых и жидких потоков является весьма сложной вычислительной задачей.

Разработано большое количество численных методов расчета ректификационных колонн. Основными из них являются методы потарельчатого расчета Лыса-Мачесона и Тиле-Геддеса, матричные методы, методы релаксации и методы, основанные на использовании различных сочетаний вышеперечисленных методов [1, 2, 3]. Эти методы позволяют производить расчет простых ректификационных колонн. Однако применительно к расчету сложных разделительных систем использование большинства из них встречает ряд трудностей, заключающихся в основном в необходимости обеспечения сходимости расчета.

Наиболее универсальным при расчете сложных ректификационных колонн является модифицированный метод релаксации. Достоинством метода является устойчивая сходимость расчета и независимость последовательности расчета тарелок, что позволяет рассчитывать колонны любой сложности. Недостатком метода является относительная медленная сходимость расчета [4]. Метод заключается в поочередном уточнении величин материальных потоков и значений составов с учетом теплового баланса на ступенях разделения [5]. Алгоритм расчета таков:

1. Определение профилей температуры и доли отгона по тарелкам совместным решением уравнения теплового баланса

$$L_{j-1} \cdot h_{j-1} + V_{j+1} H_{j+1} + F_j h_f - L_j h_j - V_j H_j + Q = 0$$

и однократного испарения

$$\sum_{i=1}^n \frac{z_{ij}}{1 + e_j(K_{ji} - 1)} = 1, \text{ при } e_j > 0,5$$

$$\sum_{i=1}^n \frac{z_{ij}K_{ji}}{1 + e_j(K_{ji} - 1)} = 1, \text{ при } e_j < 0,5,$$

где: Q – величина теплоподвода (отвода);

L, V – мольные расходы жидкости и пара;

h, H – энтальпии жидкого и парового потоков;

K – константа фазового равновесия;

F – мольный расход сырьевого потока;

z – состав смеси;

e – доля отгона смеси.

При соблюдении условий

$$\sum z_{ji}k_{ji} \geq 1; \sum z_{ji} / k_{ji} \geq 1, \quad (1)$$

где:
$$z_{ji} = \frac{L_{j-1,i} + V_{j+1,i} + F_{ji}}{L_{j-1} + V_{j+1} + F_j};$$

2. Производится коррекция первоначально принятых расходов потоков пара и жидкости и их теплосодержание, после чего вновь рассчитывают составы:

$$L_j = (1 - e_j)(L_j + V_{j+1} + F_j); V_j = e_j(L_{j-1} + V_{j+1} + F_j);$$

$$h_j = \sum x_{ji}h_{ji}; H_j = \sum y_{ji}h_{ji};$$

$$L_{ji} = L_j x_{ji}; V_{ji} = V_j y_{ji};$$

$$x_{ji} = \frac{z_{ji}}{(1 + e_j(K_{ji} - 1))}; y_{ji} = x_{ji}K_{ji},$$

где: x, y – состав смеси в жидкой и паровой фазах.

При невыполнении условия (1)

полагают в первом случае

$$L_{ji} = 0; V_{ji} = z_{ji}(L_{j-1} + V_{j+1} + F_j);$$

во втором случае

$$V_{ji} = 0; L_{ji} = z_{ji}(L_{j-1} + V_{j+1} + F_j).$$

где: i – индекс компонента;

j – индекс тарелки разделения.

Наличие воды в системе ректификации многокомпонентной смеси приводит к определенным трудностям расчета. Водяной пар в зависимости от рабочих условий может присутствовать на ступени контакта в перегретом или насыщенном состояниях. В последнем случае он, конденсируясь, приводит к образованию на ступени третьей фазы – слоя воды [6]. Соответственно расчет процесса в зависимости от состояния водяного пара будет осуществляться по-разному.

Расчет в присутствии перегретого водяного пара не вызывает затруднений. Задача в этом случае решается методом итераций при постоянном расчетном давлении $P=P_0$, например, методом, приведенном в [4, 5].

Расчет в присутствии насыщенного водяного пара проводят методом, в котором наличие водяного пара на ступени учитывают снижением давления компонентов смеси на величину упругости насыщенного водяного пара, и мольную долю водяного пара в паровой фазе определяют из условия, что парциальное давление водяного пара равно давлению насыщенного водяного пара P_z [1].

При этом возникает ряд особенностей, влияющих на сходимость вычислительного процесса.

В зависимости от температуры T и расхода воды расчетное давление P может быть различным. На рисунке 1 приведен график изменения расчетного давления в зависимости от температуры. При насыщенном состоянии водяного пара расчетное давление принимается меньшим давления на

ступени контакта на величину упругости водяного пара P_z (кривая 1). В условиях перегрева водяного пара расчетное давление принимают равным давлению на ступени P_0 (линия 2). На рисунке температура T^* соответствует температуре начала перегрева водяного пара.

Поскольку при $T=T^*$ график претерпевает разрыв первого рода, расчет ступени контакта при температурах, близких к температуре перехода водяного пара из насыщенного в перегретое состояние, бывает затруднителен, а расчет колонны может и не сойтись. Причина заключается в том, что на одной итерации расчетное давление принимается равным $P_0 - P_z$, на другой - P_0 и т.д. В этом случае предпочтительно определять P , соответствующее условию насыщения водяного пара, с учетом его значений на предыдущих итерациях, также соответствующих только условиям насыщения водяного пара. Причем, из-за возможно большого различия значений P_z соседних итераций, необходимо использовать итерационную процедуру, удовлетворяющую определенным условиям сходимости.

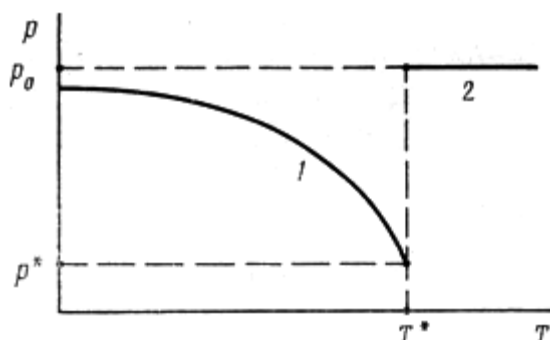


Рисунок 1. Зависимость расчетного давления от температуры

Можно показать [7], что итерационный процесс

$$p^{(k+1)} = p^{(k)} + \Delta p^{(k)},$$

$$\Delta p^{(k)} = q(p_0 - P_z^{(k)}).$$

сходится при условии $0 < q < 1$,

где: k – номер итерации.

Следующая особенность возникает при расчете с учетом теплового баланса ступени. В случае конденсации водяного пара, расчетный тепловой поток Q уменьшается на каждой итерации на величину тепла воды, как в паровой, так и в жидкой фазах. При расчете же в присутствии перегретого водяного пара тепловой поток смеси постоянен и равен Q_0 . Соответственно при $T=T^*$ график изменения теплового потока претерпевает разрыв первого рода, что также влияет на сходимость счета.

Аналогичным образом показано, что вычислительный процесс будет устойчивым, если корректировку теплосодержания смеси проводить по уравнению

$$Q^{(k+1)} = Q^{(k)} + q(Q_0 - Q_z^{(k)} - Q^{(k)}),$$

где: Q_z – суммарное тепло воды в паровой и жидкой фазах.

На основе рассмотренных алгоритмов разработан пакет прикладных программ [8], предназначенный для поверочного и проектного расчета комплексов ректификационных, абсорбционных и экстракционных колонн с заданным числом теоретических или установленных массо-теплообменных тарелок, ввода исходных смесей и вывода продуктов разделения.

При моделировании колонн с помощью программ пакета производятся следующие расчеты:

- определение качества и количества продуктов разделения;
- определение тепловой нагрузки кипятильников, конденсаторов-холодильников и др. теплообменного оборудования;
- определение расходов водяного пара, вводимого в колонны на отпарку низкокипящих углеводородов;
- расчет профилей температуры, величин и теплофизических характеристик потоков пара и жидкости по высоте колонны;
- расчет гидродинамических нагрузок тарелок по пару и жидкости.

Расчетный анализ промышленного фракционирующего оборудования позволяет разработать рекомендации по повышению эффективности работы массообменных устройств, увеличению глубины отбора целевых компонентов и фракций, повышению качества продуктов разделения, а также снижению энергетических затрат [9, 10].

Пакет программ состоит из пяти автономных программ и базы данных, реализующих вычислительные, логические и сервисные функции, написанных на алгоритмическом языке Турбо- Паскаль.

Данный пакет включает следующие программы:

- создания в диалоговом режиме файла исходных данных для расчета колонны;
- расчета физико-химических свойств углеводородных компонентов и узких нефтяных фракций в зависимости от рабочих температуры и давления с использованием базы данных;
- расчета динамических и статических режимов работы фракционирующего оборудования;
- расчета гидродинамических нагрузок по пару и жидкости массообменных устройств;
- формирования таблиц результатов расчета, построение интегральных и дифференциальных характеристик смесей и продуктов разделения.

При решении конкретной задачи реализуются две стадии: стадия вывода колонн на рабочий режим (динамики), стадия получения установившегося режима (статики) [11].

Поскольку существующий пакет программ имел проблемы совместимости с современными операционными системами, была проведена актуализация с использованием современных алгоритмических языков – Python и C++.

Выводы

Разработанный пакет программ реализует функции, позволяющие производить различные функции расчёта промышленного оборудования и в диалоговом режиме создавать файл исходных данных и формировать таблицу результатов, позволяющих разработку рекомендаций по снижению затрат, увеличению глубины отбора, повышению качества и энергоэффективности массообменных устройств.

Список используемых источников

- 1 Скобло А. И., Трегубова И. А., Молоканов Ю. К. Процессы и аппараты нефтеперерабатывающей и нефтехимической промышленности. М.: Химия, 1982. 652 с.
- 2 Александров И. А. Перегонка и ректификация в нефтепереработке. М.: Химия, 1981.
- 3 Пути совершенствования производственных процессов нефтепереработки / А. П. Мартынов, А. Ю. Абызгильдин, Л. И. Ванчухина, Я. С. Амиров, Д. А. Салимоненко, Р. Р. Бакиров // Башкирский химический журнал. 1997. Т. 4, №1. С.72-77.
- 4 Умергалин Т. Г. Математическое моделирование основных химико-технологических процессов. Уфа, 2001. 61 с.
- 5 Умергалин Т. Г., Умергалина Т. В. Расчет тепло-массообмена ступени контакта многокомпонентной смеси // Башкирский химический журнал. 2016. Т. 23, № 2. С.41-43.
- 6 Отмывка газового конденсата от солей в трубчатом турбулентном аппарате диффузор-конфузорной конструкции/ М. Е. Мурзабеков, Ф. Б. Шевляков, Т. Г. Умергалин, В. П. Захаров // Вестник Башкирского университета. 2012. Т.17, №1. С. 36-38.

7 Умергалин Т. Г. О сходимости расчета процесса ректификации в присутствии насыщенного водяного пара // Теоретические основы химической технологии. 1991. Т. 25, № 2. С. 302-305.

8 Умергалин Т. Г., Исакова З. М. Компьютерное моделирование и оптимизация производственных технологических установок // Известия ЮФУ. Технические науки. 2005. № 1 (45). С. 43-44.

9 Гафаров Ш. А., Руднев Н. А. Графические модели процессов переработки природного газа оренбургского гелиевого и газоперерабатывающего заводов. Уфа, 2007. 200 с.

10 Абызгильдин А. Ю., Руднев Н. А. Использование метода графических моделей в информационных системах предприятий // Нефтегазовое дело: электрон. науч. журн. 2004. № 2. С. 5.

11 Хафизов А. Р., Умергалин Т. Г., Абызгильдин А. Ю. Основы и расчетные исследования процессов стабилизации углеводородного сырья. Уфа, 1997. 94 с.

References

1 Skoblo A. I., Tregubova I. A., Molokanov Yu. K. Processy i apparaty neftepererabatyvayushei i neftehimicheskoi promyshlennosti. M.: Himiya, 1982. 652 s. [in Russian].

2 Aleksandrov I. A. Peregonka i rektifikaciya v neftepererabotke. M.: Himiya, 1981. [in Russian].

3 Puti sovershenstvovaniya proizvodstvennyh processov neftepererabotki / A. P. Martynov, A. Yu. Abyzgil'din, L. I. Vanchuhina, Ya. S. Amirov, D. A. Salimonenko, R. R. Bakirov // Bashkirskii himicheskii zhurnal. 1997. T. 4, №1. S.72-77. [in Russian].

4 Umergalin T. G. Matematicheskoe modelirovanie osnovnyh himiko-technologicheskikh processov. Ufa, 2001. 61 s. [in Russian].

5 Umegalin T. G., Umegalina T. V. Raschet teplo-massobmena stupeni kontakta mnogokomponentnoi smesi // Bashkirskii himicheskii zhurnal. 2016. T. 23, № 2. S. 41-43. [in Russian].

6 Otmывka gazovogo kondensata ot solei v trubchatom turbulentnom apparate diffuzor-konfuzornoj konstrukcii/ M. E. Murzabekov, F. B. Shevlyakov, T. G. Umegalin, V. P. Zaharov // Vestnik Bashkirskogo universiteta. 2012. T.17, №1. S. 36-38. [in Russian].

7 Umegalin T. G. O shodimosti rascheta processa rektifikacii v prisutstvii nasyshennogo vodyanogo para //Teoreticheskie osnovy himicheskoi tehnologii. 1991. T. 25, № 2. S. 302-305. [in Russian].

8 Umegalin T. G., Iskakova Z. M. Komp'yuternoe modelirovanie i optimizaciya proizvodstvennyh tehnologicheskikh ustanovok // Izvestiya YuFU. Tehnicheskie nauki. 2005. № 1 (45). S. 43-44. [in Russian].

9 Gafarov Sh. A., Rudnev N. A. Graficheskie modeli processov pererabotki prirodnogo gaza orenburgskogo gelievogo i gazopererabatyvayushego zavodov. Ufa, 2007. 200 s. [in Russian].

10 Abyzgil'din A. Yu., Rudnev N. A. Ispol'zovanie metoda graficheskikh modelei v informacionnyh sistemah predpriyatii // Neftegazovoe delo: elektron. nauch. zhurn. 2004. № 2. S. 5. [in Russian].

11 Hafizov A. R., Umegalin T. G., Abyzgil'din A. Yu. Osnovy i raschetnye issledovaniya processov stabilizacii uglevodorodnogo syr'ya. Ufa, 1997. 94 s. [in Russian].

Сведения об авторах

About the authors

Сахабутдинов Г. А., бакалавр гр. БТК-12-01, ФГБОУ ВО УГНТУ,
г. Уфа, Российская Федерация

G. A. Sahabutdinov, Bachelor of BTK12-01 Group, FSBEI HE USPTU,
Ufa, the Russian Federation

e-mail: metel1434@yandex.ru

Ямалдинов А. Р., бакалавр гр. БТК-13-01 ФГБОУ ВО УГНТУ, г. Уфа,
Российская Федерация

A. R. Jamaldinov, Bachelor of BTK-13-01 Group FSBEI HE USPTU, Ufa,
the Russian Federation

e-mail: yamaldinov.1995@mail.ru

Руднев Н. А., канд. техн. наук, доцент кафедры «Химическая
кибернетика» ФГБОУ ВО УГНТУ, г. Уфа, Российская Федерация

N. A. Rudnev, Candidate of Engineering Sciences, Associate Professor of
the Chair «Chemical Cybernetics» FSBEI HE USPTU, Ufa, the Russian
Federation

e-mail: ngb2008@mail.ru

Абызгильдин А. Ю., д-р техн. наук, заведующий кафедрой
«Инженерная графика» ФГБОУ ВО УГНТУ, г. Уфа, Российская Федерация

A. Yu. Abyzgildin, Doctor of Engineering Sciences, Head of the Chair
«Engineering Graphics» FSBEI HE USPTU, Ufa, the Russian Federation

e-mail: infair@yandex.ru