

汽相和液相流动模型

对一个级最简单的流动模型对应于汽相完全混合和液相完全混合的假定。在这种条件下,式(12-27)和式(12-28)中的传质推动力简化为

$$(y^V - y^L)_{\text{avg}} = (y^V - y^I) \quad (12-46)$$

$$(x^I - x^L)_{\text{avg}} = (x^I - x^L) \quad (12-47)$$

式中 y^V 和 x^L 是离开该级的摩尔分率。这类流动模型只适用于短液体流道的板式塔。

汽相和/或液相的活塞流模型假定这些相以没有混合的方式移动通过泡沫层。这种流动模型要求对整个泡沫层积分传质速率。Kooijman 和 Taylor[31]提出了一种近似积分方法,他们假定恒定的传质系数和界面组成。得到的平均摩尔分率推动力表示式与式(12-46)和式(12-47)相同,除了采用位于每个方程右边的利用 N^V 或 N^L 表示的校正因子外。对板式塔,活塞流模型比完全混合流动模型更精确,活塞流模型还可用于填料塔。

如 6.5 节中所讨论的,完全混合模型和活塞流模型是 Lewis[7]提出的可将 Murphree 汽相点效率转化为 Murphree 汽相板效率的两种流动模型。这两种模型代表两种极端情况。Fair、Null 和 Bolles[32]推荐了一种利用湍流 Peclet 数的更接近实际的部分混合或分散模型,Peclet 数的数值可覆盖很宽的范围。这种模型在两种极端情况间提供了过渡区。

对反应精馏,基于速率的多室(或混合池)模型被证明是有用的。在这种模型中,假定塔板上的液体通过几个(可能为 4 或 5 个)串联的完全混合室水平流过塔板。在可在 v4.3 版的 ChemSep 程序中调用的 Higler、Krishna 和 Taylor 模型[40]中,假定每一小室中的汽相也是完全混合的。如果需要,每块板上的小室也可在垂直方向上重叠。于是,一块板的模型可能有 5×5 个小室排列组成,完全混合室的总数为 25 个。Higler、Krishna 和 Taylor 假定离开最顶上的各小室的汽相物流在分流进入下一块板的各小室前被收集和混合。Pyhalahiti 和 Jakobsson[41]的基于速率的多室模型只考虑水平方向上的一组小室,但离开一块塔板上的各小室的汽相物流在进入下一块板的各小室前可以混合,也可以不混合,而如图 6.21 所示,各板间液体的流动方向相反。

计算方法

如 12.1 节所指出的,当忽略压降方程时,图 12.1 的基于速率模型每块板的单个小室要求解的方程数为 $5C+5$ ^①,如表 12.1 所列。这些方程包含列于表 12.2 的变量。方程中的其他参数可由这些变量计算。当变量数减去方程数,全塔的自由度数为 $2NC+9N+1$ 。如果

规定总级数和包括进料位置的全塔各进料的状态($2NC+4N+1$ 个变量),那么采用表 12.2 的变量标识,剩余的自由度数为 $5N$ 。基于速率模型的计算机程序通常需要用户规定这 $2NC+4N+1$ 个变量。在选择剩余的 $5N$ 个自由度时为用户提供的灵活性的程度,取决于特定的基于速率模型的计算机算法,广泛使用的三种算法是:(1)Taylor 和 H. A. Kooijman 的 ChemSep v4.3 版;(2)位于麻萨诸塞州剑桥的 Aspen 技术公司的 ASPEN PLUS 第 12 版中的 RATEFRAC;(3)CHEMCAD 5.4 版。这些算法都提供了各种热力学和传递性质关联式。

在剩余的 $5N$ 个规定的选择方面,这些程序都提供了相当大的灵活性。基础的 $5N$ 个规定为

$$r_j^L \text{ 或 } U_j, r_j^V \text{ 或 } W_j, p_j, Q_j^L \text{ 和 } Q_j^V$$

但是,如下所述,可对这些规定进行替换。

ChemSep 程序

ChemSep 程序适用于塔板或高度较小的填料(段)的传递方程。冷凝器和再沸器级视为平衡级。规定选项包括:

(1) r_j^L 和 r_j^V :对每一级,液相或汽相侧线可规定为(a)侧线流量或(b)侧线流量与到下一级的剩余流体流量之比,即图 12.1 中的 $r_j^L=U_j/L_j$ 或 $r_j^V=W_j/V_j$ 。

(2) p_j :有四种选择:

(a) 冷凝器(如有)压力和恒定的但塔内各级不同的压力及再沸器(如有)压力。

(b) 冷凝器(如有)压力、塔顶压力和塔底压力(塔底级或再沸器,如有)。塔顶和塔底之间各级压力通过线性内插确定。

(c) 冷凝器(如有)压力、塔顶压力和规定的每级压降,求取其余各级的压力。

(d) 冷凝器(如有)压力、塔顶压力和由水力学关联式通过 ChemSep 估算的各级压降。

(3) Q_j^L 和 Q_j^V :除冷凝器和再沸器(如有)外,必须规定各级的加热器和冷却器的热负荷。此外,可将塔的热损失规定为平均分配于各级的热损失。当设有冷凝器时(全凝不过冷、全凝过冷和分凝),用下列规定之一代替冷凝器热负荷:(a)摩尔回流比;(b)冷凝液温度;(c)馏出液摩尔流量;(d)摩尔回流量;(e)馏出液的组分摩尔流量;(f)馏出液中某组分的摩尔分率;(g)所有进料中的某组分在馏出液中的回收率;(h)馏出液占有所有进料的摩尔分率;(i)馏出液某两个组分的摩尔比。

对于精馏,常用的规定是摩尔回流比。

当有再沸器(部分再沸、全沸蒸气产物、全沸过热蒸气产物)时,可用类似于上述冷凝器的下列规定选项代替再沸器热负荷:(a)摩尔蒸出比;(b)再沸器温度;(c)塔底产物摩尔流量;(d)再沸蒸气(蒸出)摩尔流量;(e)塔底产物的组分摩尔流量;(f)塔底产物中某组分的摩尔分率;(g)所有进料中的某组分在塔底产物中的回收率;(h)塔底产物占有所有进料的摩尔分率;(i)塔底产物中某两个组分的摩尔比。对于精馏,常用的规定是塔底产物摩尔流量,如未规定,必须对此变量进行估计。

前述可选规定的数目是相当大的。此外,ChemSep 还提供了可代替冷凝器和/或再沸器热负荷的“灵活”规定。这些是以字符串形式提供的高级规定,包括某些允许变量的数值和/

或利用五个算术运算符(+、-、*、/和乘方)的这些变量的组合。这类变量包括任一级的级变量(L 、 V 、 x 、 y 和 T)和界面变量(x^1 、 y^1 和 T^1)，流量可采用摩尔或质量单位。

某些选项和高级选项的使用必须非常小心，因为其数值规定不当可能导致不能收敛。例如，对于级数固定的简单精馏塔，级数可能小于为达到规定馏出液和塔底产物纯度所需的最小级数。由标准的一对塔顶和塔底规定条件——例如回流比和对应于要求的馏出液流量的塔底产物摩尔流量——来开始进行模拟计算通常是明智的。这类规定几乎肯定能收敛，除非在塔内某些位置级间液相或汽相流量趋近于零。对计算结果的研究将为了了解采用其他选项时可能存在的限制提供有价值的信息。

基于速率模型的方程，有些是线性的，有些是非线性的，可用类似于第 10 章中所述 Naphtali 和 Sandholm 提出的求解基于平衡模型的牛顿法求解。于是，按级对变量和方程进行分组，使 Jacobian 矩阵具有分块三对角形式。但是需求解的方程数为每级 $5C+6$ 个或 $5C+5$ 个，取决于各级上的压力是计算得到的还是规定的，而与之相比，对基于平衡模型，求解的方程数仅为 $2C+1$ 个。

传递系数和压降的计算需要塔径和塔内构件的尺寸。这些可为规定的(模拟型)或需计算的(设计型)。对后一种情况，为内构件选用默认的尺寸，而对板式塔或填料塔，根据液泛速度的规定百分数计算塔径，或对填料塔根据单位填料高度的规定压降计算塔径。

对设计型计算，每次迭代的计算时间约为模拟型计算的两倍，模拟型计算需要的时间通常少于基于平衡模型的两倍。设计型计算所需的迭代次数可能为基于平衡模型的两到三倍。总而言之，与基于平衡模型相比，设计型计算的总计算时间的增加不会超过一个数量级。利用目前的快速工作站或个人电脑，基于速率模型的设计型计算所需的时间通常少于 1 分钟。

与 Naphtali - Sandholm 法相似，基于速率模型主要利用 Jacobian 矩阵中的解析偏导数，并需要所有变量的初值。这些初值可利用 Powers 等[33]的方法由 ChemSep 程序自动产生。在 Powers 等的方法中，采用恒摩尔流和线性温度分布等通常采用的假定。各级摩尔分率的初值通过利用理想 K 值的几次泡点法迭代计算产生，随后将这些摩尔分率用于第一次迭代计算和非理想 K 值的计算。初始界面摩尔分率设定等于估算的主体值，而初始传质速率被任意设定为 $\pm 10^{-3}$ kmol/h，符号取决于该组分的 K 值。

为防止振荡和加速迭代收敛，可限制每次迭代中某些变量的校正量。默认值对温度为 10K，对流量为 50%。当摩尔分率的校正量导致其数值超出可行域 0 到 1 时，缺省的校正量是达到极限值的步长的一半。对非常难解的问题，可采用 Powers 等[33]所描述的同伦-延续法促进收敛。

牛顿法的收敛可如同 Naphtali - Sandholm 法由各函数的残差值确定，或由各变量的校正值确定。ChemSep 采用两种判据，并当下列判据之一满足时结束迭代：

$$\left[\sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^{N_j} f_{k,j}^2 \right]^{1/2} < \epsilon \quad (12-48)$$

$$\sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^{N_j} |\Delta X_{k,j}| / X_{k,j} < \epsilon \quad (12-49)$$

式中

$f_{k,j}$ ——表 12.1 中的残差；

N ——级数；

率和 Murphree 汽相板效率的分布如图 12.2 所示,图中各级从塔顶到塔底进行编号,级 2 到 21 为筛板。计算所得的 Murphree 板效率汇总于下:

组分	Murphree 板效率	
	范 围	中 值
正庚烷	0.52~1.10	0.73
甲苯	0.70~0.79	0.79
甲乙酮	-3.23~1.14	0.76

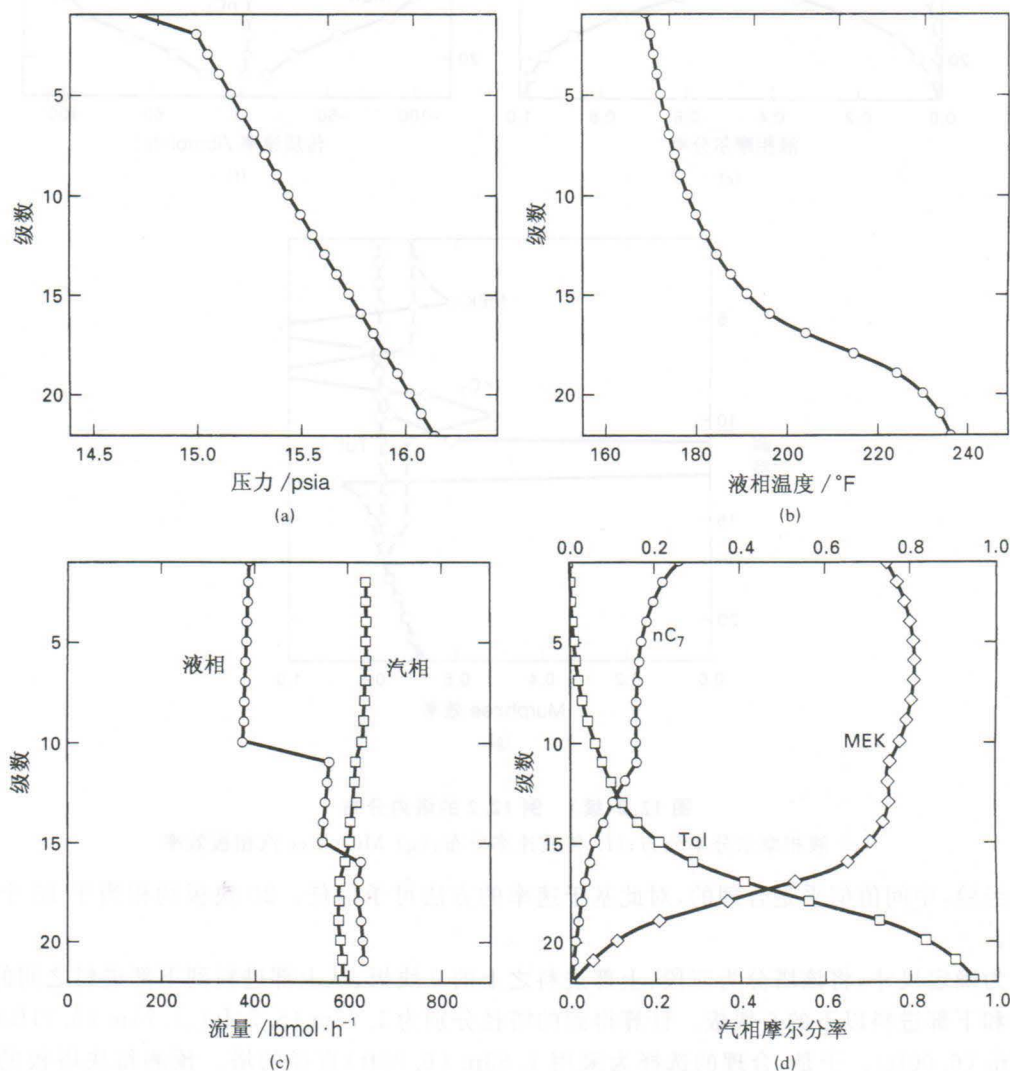


图 12.2 例 12.2 的塔内分布

(a) 压力分布;(b) 液相温度分布

(c) 汽相和液相流量分布;(d) 汽相摩尔分率分布

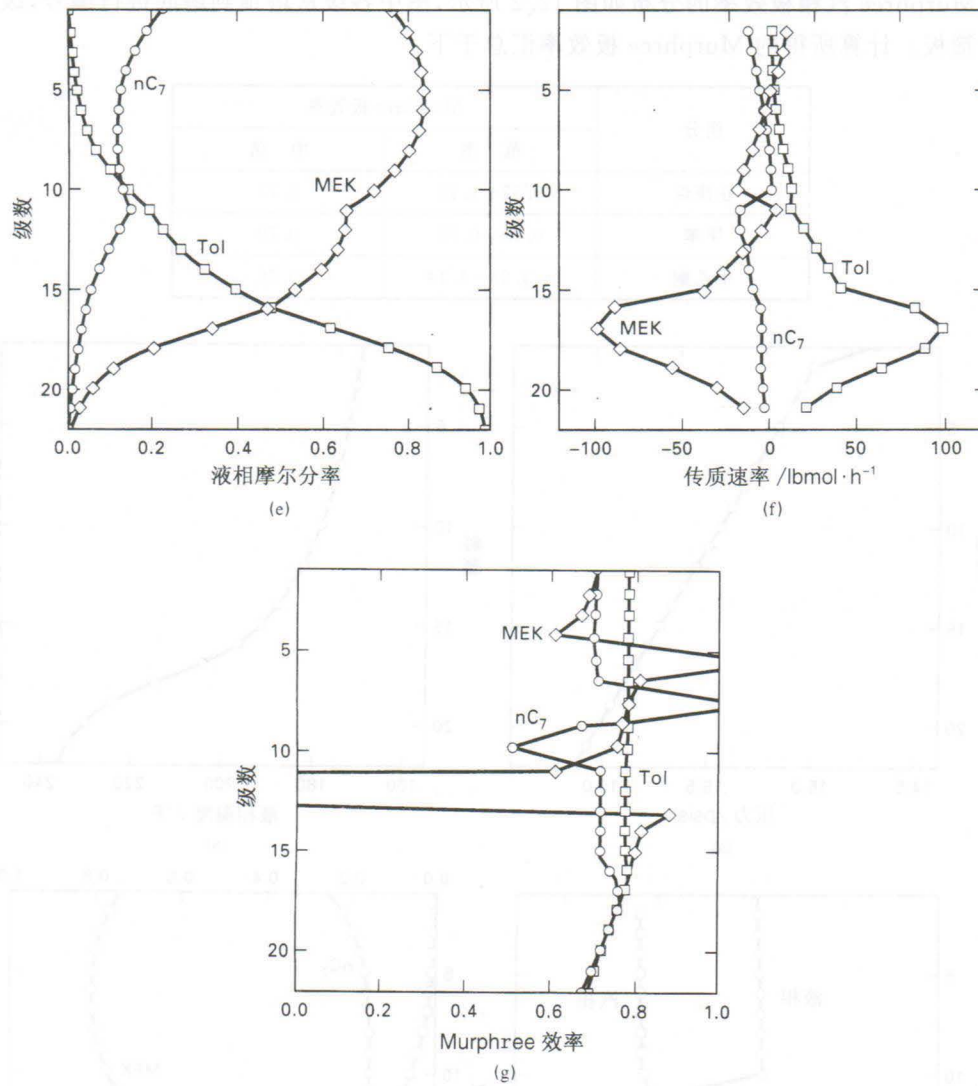


图 12.2(续) 例 12.2 的塔内分布

(e) 液相摩尔分率分布; (f) 传质速率分布; (g) Murphree 汽相板效率

根据经验,中间值似乎是合理的,对此基于速率的方法可予信任。20 块板约相当于 15 个平衡级。

为确定尺寸,将该塔分为三段:上部进料之上的 9 块板、从上部进料到下部进料之间的 5 块板和下部进料以下的 6 块板。计算得到的塔径分别为 1.75m (5.74ft)、1.74m (5.71ft) 和 1.83m (6.00ft)。于是,合理的选择为采用 1.83m (6.00ft) 直径的塔。预测每块塔板的平均压降为 0.06psi。计算得到的热负荷如下所列:

冷凝器:2.544MW (8 680 000 Btu/h)

再沸器:2.482MW (8 470 000 Btu/h)