

INSTITUTUL POLITEHNIC BUCUREȘTI  
FACULTATEA UTILAJE ȘI INGINERIA PROCESORILOR CHIMICE  
CATEDRA DE INGINERIE CHIMICĂ

*Bomnuls, prof. dr. ing. Zeno Grosșianu*

*cu toate mulțumirile pentru  
solicitudinea și amabilitatea acordată*

*1985*

Ing. Woinaroschy Alexandru Eligiu

TEZA DE DOCTORAT

Conducător științific,  
Prof.dr.ing.R. Kissil

BIBLIOTECA CENTRALĂ  
UNIVERSITATEA "POLITEHNICĂ"  
TIMIȘOARA

- 1985 -

INSTITUTUL POLITEHNIC TIMIȘOARA

59486

Volume \_\_\_\_\_

Data 3 III 85

# **SIMULAREA SISTEMELOR INDUSTRIALE**

Prezenta teză de doctorat a fost elaborată în cadrul Catedrei de Inginerie Clinică a Institutului Politehnic București sub conducerea științifică a prof. dr. ing. R. Mihail căruiă țin pe această cale să-i mulțumesc în mod deosebit pentru înalta competență și exigența cu care mi-a îndrumat activitatea.

Țin să aduc mulțumiri și adâncă recunoștință prof. dr. ing. O. Smigelschi care m-a ajutat în mod deosebit în toate etapele elaborării și redactării tezei de doctorat, precum și în întreaga mea activitate științifică și didactică.

Imi exprim întreaga gratitudine primului meu dascăl de științe fizice și chimice prof. A. Negoescu

În încheiere, dar nu în ultimul rând, mulțumesc soției și părinților care m-au încurajat și mi-au creat condițiile și ambianța de lucru necesare

## C O U P R I N S

	<u>Pag.</u>
1. PREZINTAREA GENERALA A TEMEI, OBIECTIVELOR, MODULUI DE ABORDARE SI PREMIZELOR . . . . .	3
2. SINTEZA OPTIMA A SISTEMELOR DE SEPARARE PRIN RECTIFICARE A AMESTECURILOR MULTICOMPONENTE . . .	15
2.1. Cadrul general al problemei . . . . .	15
2.2. Prefigurarea modului de abordare . . . . .	17
2.3. Elaborarea unui model simplificat pentru calculul optim al coloanelor de rectificare .	19
2.4. Elaborarea unui model simplificat pentru calculul optim al condensatoarelor . . . . .	33
2.5. Elaborarea unui model simplificat pentru calculul optim al refierbatoarelor . . . . .	40
2.6. Sinteza modulară optimă aplicată la proiectarea sistemelor de separare prin rectificare a amestecurilor multicomponente . . . . .	43
3. SIMULAREA DINAMICA A SISTEMELOR DE SEPARARE PRIN RECTIFICARE A AMESTECURILOR MULTICOMPONENTE . . .	71
3.1. Cadrul general al problemei . . . . .	71
3.2. Un nou model pentru simularea dinamică a proceselor de separare prin rectificare . .	73
3.3. Testarea modelului elaborat . . . . .	92
3.3.1. Algoritmul utilizat și programele de calcul elaborate . . . . .	92
3.3.2. Testarea modelului cu ajutorul semnalelor treaptă și oscilante . .	99
3.3.3. Testarea modelului pe bază de deter- minări experimentale . . . . .	105

.//.

	<u>Pag.</u>
3.4. Aplicații ale modelului elaborat . . . . .	109
3.4.1. Stabilirea de relații pentru estimarea duratei regimului tranzitoriu la pornirea proceselor de rectificare . . . . .	110
3.4.2. Determinarea unei strategii pentru reducerea duratei regimului tranzitoriu la pornirea proceselor de rectificare . . . . .	119
4. ANALIZA PRIN SIMULARE DINAMICA A SISTEMELOR DE COLOANE DE RECTIFICARE INTERCONECTATE . . . . .	123
4.1. Analiza prin simulare dinamică a dimensionării coloanelor de rectificare . . . . .	123
4.2. Simularea dinamică a sistemelor de coloane de rectificare interconectate . . . . .	131
5. CONCLUZII GENERALE . . . . .	134
BIBLIOGRAFIE . . . . .	139

Anexa: 2 vol. (1309 pagini scrise) conține instrucțiunile și rezultatele programelor de calcul elaborate în cadrul tezei și se află depusă pentru consultare la Catedra de Inginerie Chimică, la conducătorul științific.

Evoluția actuală către abordarea sistemică întâlnită în majoritatea domeniilor de activitate este prezentă și în cadrul ingineriei chimice. Justificată de necesitățile de proiectare și exploatare optimă și înlesnită de deosebita dezvoltare a mijloacelor și tehnicilor de calcul, tratarea instalațiilor industriale chimice ca sisteme fermate din elemente complex interconectate a cunoscut în ultimul timp o largă dezvoltare, atât din punctul de vedere al ariei de probleme abordate, cât și al nivelului de profunzime al respectivelor rezolvări.

În cadrul ingineriei sistemelor, simularea reprezintă o activitate centrală, absolut indispensabilă, indiferent că se urmărește îmbunătățirea unor sisteme existente sau crearea unor sisteme noi, cu performanțe cât mai ridicate.

Prezenta teză de doctorat urmărește să contribuie la elucidarea unor probleme ce apar în cadrul analizei și sintezei sistemelor industriale chimice folosind în acest scop simularea în înțelesul ei cel mai general, respectiv acela de elaborare, testare și utilizare de modele matematice.

Principalele direcții teoretice abordate în cadrul tezei au fost:

- sinteza optimă a unor sisteme implicând operații unitare diferite, utilizând în acest scop elaborarea de modele de calcul rapid al elementelor componente, care să ofere soluții cât mai avantajoase în raport cu un anumit obiectiv (cap.2).

- simularea dinamică a unor mecosisteme utilizând modele cu un grad sporit de complexitate față de cele utilizate până în prezent (cap.3).

- analiza folosind metode complexe a sistemelor alcătuite din elemente dimensionate pe baza unor metode rapide, simplificate (caz.4).

Aplicațiile la problemele anterior expuse s-au concretizat în domeniul sistemelor de separare prin rectificare a amestecurilor multicomponente; din punct de vedere teoretic aceste sisteme prin complexitatea, implicarea de operații unitare diferite și numărul mare de grade de libertate constituie un domeniu ideal de aplicații al problematicei abordate. Din punct de vedere practic, importanța acestor sisteme industriale rezultă din frecvența apariției lor atât în instalațiile din industria chimică, cât și într-o serie de alte ramuri înrudite, precum și din importanțele cheltuieli de investiții și exploatare (cu precădere energetice) implicate.

În consecință, în teza de doctorat s-a urmărit obținerea unor rezultate cu aplicabilitate imediată și importanță economică evidentă.

## 1. PREZENTAREA GENERALA A TEZEI, OBIECTIVELOR, MODULUI DE ACORDARE SI PREVIZELOR

Necesitățile de proiectare și exploatare a instalațiilor chimice în condiții optime, precum și progresul deosebit realizat în ultimii 25 de ani în domeniul tehnicii de calcul au condus la apariția unui nou domeniu al ingineriei chimice și anume cel al ingineriei sistemelor chimice. Evoluția către abordarea sistemică este o caracteristică actuală a multor domenii de activitate, atât tehnice cât și netehnice. În ingineria chimică metoda operațiilor unitare studiază fiecare aparat al unei linii tehnologice, tratat ca independent. În ipoteza că fiecare aparat ar funcționa în condiții optime, instalația în totalitate s-ar putea să nu realizeze performanțele optime. Interconectarea aparatelor în sisteme complexe face ca regimul de funcționare al acestora să fie influențat de funcționarea altor aparate din schema tehnologică, impunându-se necesitatea tratării instalațiilor chimice ca sisteme formate din elemente complex interconectate.

În cadrul ingineriei sistemelor simularea constituie metoda de investigare cea mai puternică și avantajoasă, fie că se studiază un sistem existent în scopul îmbunătățirii sale, fie că se urmărește conceperea unui nou care să corespundă anumitor cerințe. Noțiunii de simulare i s-au asociat conținuturi cu arii de cuprindere diferite. În sensul cel mai larg, în care va fi considerată și în cadrul prezentei lucrări simularea corespunde cu activitatea de construire și utilizare a modelelor. În această ordine de idei este de menționat, oniar dacă prezintă aspecte critice inerente oricărei încercări de definiție, pe cea dată de C.W. Churchman /1/ simulării :

" x simulează y este adevărat dacă: a) x și y sînt sisteme formale; b) y corespunde cu un sistem real; c) x corespunde cu o



aproximare la un sistem real; d) regulile utilizate în x sînt corecte".

În consecință, tema prezentei lucrări corespunde cu elaborarea, testarea și utilizarea modelelor matematice a instalațiilor industriale chimice (sau a unor părți a acestora) tratate ca sisteme compuse din elemente interconectate.

Importanța deosebită a temei rezultă din enumerarea a mai multor scopuri posibile /2, 3/ din cadrul simulării unui sistem industrial chimic:

- reducerea etapelor de dezvoltare ale unui nou proces tehnologic prin eliminarea cercetărilor în instalație pilot și/sau semiindustrială;
- proiectarea funcționării la parametrii optici în raport cu un anumit criteriu a unei instalații tehnologice complexe;
- îmbunătățirea exploatarei unei instalații în funcțiune prin creșterea randamentului de transformare a materiei prime, reducerea consumului energetic, îmbunătățirea calității produselor finite etc.,
- scurtarea duratelor de regim tranzitoriu și menținerea proceselor în regimuri de funcționare staționare stabile;
- depistarea, în scopul prevenției, a unor posibilități de avarii;
- implementarea automatizării complexe a instalațiilor prin conducerea cu calculatoare de proces.

Vastitatea temei impune din capul locului o delimitare precisă a directiilor teoretice abordate în cadrul tezei, precum și a aplicațiilor practice respective.

Investigarea literaturii consacrate ingineriei sistemelor chimice a orientat cercetările din cadrul prezentei lucrări către următoarele direcții, considerate incomplet sau incipient studiate și prezentînd un deosebit interes practic:

- disponibilitatea de modele de calcul rapid al elementelor sistemelor chimice care să ofere soluții cât mai avantajoase în raport cu un anumit obiectiv (modele simplificate care să ofere soluții optime în același timp).

- sinteza detaliată (înțelegând prin aceasta obținerea tuturor datelor tehnologice necesare proiectării) a unor sisteme industriale optim concepute, implicând operații unitare diferite

- simularea dinamică a unor macrosisteme utilizând modele pentru regim dinamic cu un grad sporit de complexitate;

- utilizarea combinată a modelelor simplificate, pentru calcul rapid, cu cele complexe, în cadrul ingineriei sistemelor chimice.

Aplicațiile la cercetările din direcțiile anterior menționate s-au axat pe domeniul sistemelor de separare prin rectificare a amestecurilor multicomponente. Motivația este atât de ordin teoretic, cât și practic. Astfel din punct de vedere teoretic aceste sisteme prin complexitatea, implicarea de operații unitare diferite și numărul mare de grade de libertate constituie un domeniu ideal de aplicații al problemelor expuse anterior. Din punct de vedere practic importanța sistemelor de separare prin rectificare este deosebită: ele sînt prezente în majoritatea covârșitoare a instalațiilor chimice și petrochimice fiind utilizate de asemenea și într-o serie de alte ramuri industriale (fizică industrială, industrie ușoară, alimentară etc.). Cheltuielile de investiții și exploatare (din care circa 70% sînt cheltuieli energetice /12/) implicate în sistemele de separare prin rectificare sînt ridicate, astfel că orice fabricație dusă la proiectare și exploatarea acestora poate conduce la economii deosebit de însemnate.

În conformitate cu delimitările prezentate, se expun în continuare obiectivele urmărite în cadrul tezei precum și modul lor de acordare.

In capitolul 2, obiectivul central îl constituie elaborarea unei noi metode de sinteză (ce va fi denumită sinteză modulară optimă) a sistemelor industriale chimice, în care intervin diverse operații unitare. Principiul metodei constă în sinteza optimă a respectivului sistem din grupa de elemente obligatorii prezente în proces (ce vor fi denumite module), optim dimensionate la rândul lor.

Astfel, într-un sistem de separare prin rectificare a unui amestec multicomponent un astfel de modul îl formează o coloană de rectificare împreună cu condensatorul și reîerbatatorul aferent. Modulele respective sînt dimensionate cu ajutorul unor modele simplificate ce estimează soluția optimă în raport cu criteriul minimizării cheltuielilor totale. Una din modalitățile de elaborare a acestor modele îl constituie corelarea rezultatelor simulării pentru diferite condiții de lucru; respectivele simulări se efectuează anterior și independent de respective problemă de sinteză.

Disponibilitatea de respectivele modele simplificate reduce dificultățile deosebite pe care le ridică problemele de sinteză a sistemului din ingineria chimică, fiind posibilă o tratare exhaustivă a acestora și cu implicații practice imediate. Soluțiile aplicațiilor efectuate urmărind sinteza optimă a unui sistem de separare prin rectificare a amestecurilor multicomponente sînt confruntate în scopul verificării metodei cu un set de reguli euristice rezultate din practica proiectării și exploatarei respectivelor procese.

In capitolul 3 obiectivul urmărit constă în simularea în regim dinamic a sistemelor de rectificare a amestecurilor multicomponente pe baza unui nou model cu un grad sporit de complexitate și exactitate. Realizarea compromisului între complexitate și reducerea dificultății de soluționare se obține prin desco-

punerea sistemului cu parametri distribuiți spațial și temporal (colcană de rectificare) în elemente cu parametri concentrați spațial și distribuiți temporal (talere), precum și prin găsirea unei modalități originale de eliminare a calculelor iterative implicate în modelele similare prezente în literatură. Datorită originalității respectivelor modele s-a impus testarea sa minuțioasă prin studiul răspunsului dinamic al sistemului pentru diferite tipuri de semnale și prin confruntarea cu date obținute experimental.

Modelul dinamic elaborat permite abordarea în continuare două aplicații deosebit de importante din punct de vedere practic: stabilirea de relații pentru estimarea duratei regimului tranzitoriu la pornirea proceselor de rectificare și determinarea unei strategii pentru reducerea respectivelor perioade.

În capitolul 4 se urmăresc posibilitățile de utilizare combinată a modelelor simplificate cu cele complexe. Astfel, pentru dimensionarea unui sistem de coloane interconectate pentru separarea amestecurilor multicomponente, soluțiile obținute cu ajutorul unor modele de calcul rapid de tipul celor expuse în capitolul 2 sînt verificate și eventual ajustate cu ajutorul modelului complex expus în capitolul 3. În final se face o simulare dinamică a întregului sistem de coloane interconectate în scopul demonstrării posibilităților de extindere a sistemelor abordate.

Prezizele care au stat la baza selectării obiectivelor sus-menționate decurg dintr-o scurtă prezentare a apariției și dezvoltării ingineriei sistemelor chimice, fiind necesară totodată și definirea unor concepte utilizate pe parcursul lucrării.

Apariția domeniului a fost, așa cum s-a menționat anterior, rezultatul firesc al cerințelor de fabricație și concepții

noilor procese tehnologice și a exploatării celor existente, precum și al evoluției mijloacelor de calcul. Ingineria sistemelor cuprinde două direcții fundamentale de studiu: analiza și sinteza sistemelor.

În timp ce analiza are ca obiect cunoașterea cât mai precisă a comportării unui sistem cu o structură dată, printr-o descompunere convenabilă în subsisteme, sinteza urmărește creerea de noi sisteme cu o structură care să îndeplinească anumite funcțiuni impuse. Deținind structura unui sistem ca fiind totalitatea elementelor și a relațiilor dintre elemente, trebuie subliniat caracterul ierarhizat al structurii sistemelor: elementele unui sistem sînt la rîndul lor sisteme cu o structură organizată, "subsisteme", în timp ce sistemul ca atare reprezintă o unitate, un subsistem, al unui sistem de ordin superior.

Respectiva concepere a structurii și caracterul ei ierarhizat permit ca abordarea sistemică a diferitelor probleme să conducă la o serie de avantaje cum sînt : studiul interdependențelor, posibilitățile de descompunere în subprobleme de dimensiuni și dificultăți mai reduse, decelarea aspectelor esențiale de cele mai puțin importante cu posibilitățile de simplificare ce decurg din aceasta etc.

În raport cu analiza, sinteza sistemelor se situează pe o treaptă superioară de complexitate, prin implicarea aspectelor de activitate corespunzătoare. Sinteza nu poate fi concepută înă în afara analizei, sistemul nou creat fiind obiectul acesteia pentru a se determina dacă îndeplinește funcțiunile impuse și modul în care o face. În consecință în dezvoltarea ingineriei sistemelor din orice domeniu, inclusiv a celor industriale omnice, dezvoltarea metodelor și tehnicilor de analiză a precedat pe cea a celor de sinteză.

Operînd cu modele, ingineria sistemelor indiferent că

urmărește o activitate de analiză sau sinteză implică utilizarea simulării în scopul evaluării ipotezelor și deciziilor formulate. Simularea, concepută în sensul larg al noțiunii (în cele ce urmează se va prezenta și un sens restrâns) ca o activitate de construire și utilizare de modele este mult mai veche decât abordarea sistemică a diferitelor domenii. Extrapolând noțiunea de mod (prin care actualmente se subînțelege de regulă model matematic) apariția simulării poate fi considerată ca fiind odată cu apariția omului, iar varietatea activităților de simulare este inimaginabilă: de la picturile rupestre și sculpturile antichității la modulul de aselenizare și modelele proceselor de gândire creativă. Sensul actual al cuvântului își are originea în folosirea la sfârșitul deceniului 5 al secolului nostru a metodei Monte Carlo de către von Neumann și Ulam pentru rezolvarea unor probleme (blindaje nucleare) prea costisitoare pentru soluționarea prin experiment și prea complicate pentru o tratare analitică.

În ingineria chimică noțiunii de simulare i s-a asociat de regulă următorul înțeles mai restrâns: variabile fizice care intervin într-un anumit model de proces industrial chimic sînt împărțite în: 1) variabile de intrare pentru caracterizarea fluxurilor de materiale incidente procesului, 2) variabile de proiectare (sau dimensionare) ce caracterizează procesul propriu-zis și utilajul sau utilajele în care are loc și 3) variabile de ieșire ce caracterizează fluxurile materiale emergente procesului. Prin simulare se consideră de regulă calculul variabilelor de ieșire în baza valorilor atribuite variabilelor de intrare și a celor de proiectare. Se folosesc în acest sens noțiunile de "model de simulare" pentru un model utilizat în modul anterior expus și "model de dimensionare" pentru acel model utilizat la calculul variabilelor de proiectare pe baza valorilor atribuite celor de intrare și ieșire. Această împărțire trebuie deci pri-



vită nu referitoare la conținutul modelului, acesta fiind totalitatea de relații apte să descrie în mod corect interdependențele variabilelor din respectivul proces, ori de modul în care este soluționat în raport cu setul de mărimi necunoscute. Este posibil ca pe viitor, această delimitare să se atenueze odată cu trecerea la calculatoarele de generația a Va în care cercetătorului îi va reveni în principal conceperea modelului, în timp ce alegerea și formularea algoritmului de rezolvare va intra într-o proporție tot mai mare în atribuțiile respectivului software.

Inceputurile utilizării pe o scară mai largă a calculatoarelor electronice (aprox. anul 1960) corespund în ingineria chimică cu rezolvarea unor probleme de analiză de microsisteme, respectiv dimensionarea tehnologică cu ajutorul calculatorului a unor utilaje izolate: schimbătoare de căldură, coloane de separare, reactori.

Dezvoltarea ulterioară a mijloacelor de calcul din punct de vedere al vitezei și capacității de memorie, scăderea prețului de cost al acestora și în consecință creșterea disponibilității lor au permis abordarea unor probleme de analiză de sistem industrial chimic tot mai evoluate fie prin sporirea complexității modelelor utilizate, fie prin creșterea dimensiunilor sistemului. Concret s-a trecut la etapa simulării funcționării unor aparate în regim dinamic (ceea ce a necesitat formularea și rezolvarea unor modele mai complexe, cu parametrii distribuiți) și la analiza unor sisteme extinse, corespunzătoare unor instalații complexe funcționând în regim staționar. Această ultimă problemă a fost deosebit de abordată la sfârșitul deceniului 7. Astfel, în cadrul diferitelor companii, instituții de cercetare, proiectare, învățământ s-au elaborat ca rod al colaborării unor echipe complexe de ingineri chimiști, ingineri mecanici, matematicieni,

automatiști, economiști, programatori, pachete de programe de analiză a sistemelor industriale chimice avînd ca scop fie dimensionarea tehnologică a acestora pentru o structură dată, fie cercetarea unor posibilități de îmbunătățire a exploatării lor.

Concepute în totalitatea cazurilor pentru procese în regim staționar aceste pachete de programe constau dintr-un program executiv central și o serie de module pentru: determinarea secvenței de calcul, simularea diferitelor tipuri de utilaje, respectiv de procese unitare, calculul proprietăților fizice implicate, accelerarea convergenței calculelor iterative, evaluarea indicatorilor tehnico-economici, tehnici de optimizare, introduceri de date și extrageri de rezultate.

În tabelul 1.1 sînt prezentate /3/ o serie de astfel de pachete de programe indicîndu-se autorii și exemple de aplicații.

În anul 1968 apare prima lucrare dedicată sintezelor sistemelor din ingineria chimică /4/. Pînă la mijlocul deceniului trecut numărul lucrărilor din acest domeniu a fost într-o continuă creștere, apărînd chiar și o monografie /5/. Dificultatea problemei și obținerea de rezultate mai mult cu unele aspecte teoretice, decît cu aplicabilitatea practică imediată, au făcut ca în continuare numărul de lucrări și rezultate obținute în acest domeniu să fie dăstul de reduse. Pe lîngă aspectul creativ, dificultatea sintezelor optime a sistemelor din ingineria chimică este net superioară comparativ cu alte domenii cum sînt automatica, electroenergetica, unde s-au înregistrat realizări însemnate în această direcție. Respectivul progres se datorează diversității reduse de elemente "primare" din aceste domenii (element capacitiv, element inductiv, element rezistiv), precum și modului simplu de caracterizare a canalelor de informație între elemente, în general printr-o singură mărime - de exemplu - intensitatea curentului electric.



Tabelul 1.1

Denumirea prescurtată	N-u m e l e întreg	Instituția care l-a elaborat	Exemple de aplicații
CnEOPS	Chemical Engineering Optimisation System	Shell Development , Co,	Rafinării, fabricarea izoprenului, etilen-oxidului, propilenei
Chevron system	Generalized heat and Material Balancing System	Chevron Research, Co,	Procese de hidrozalchilări
CHIPS	Chemical Engineering Information Processing System	Service Bureau Corp.	Procese ie condensare în trepte
GIPS	Generalized Inter-related Flow Simulation	Service Bureau Corp.	Fabricarea dicloretilenei
MAEBE	Material and Energy Balance Execution	Universitatea din Tennessee	Procese ipotetice implicând reacții, transfer termic și de masă
Flexible Flowsheet		Kellogg ,Co,	Reformare catalitică, sinteza amoniacului, rafinării
PACER	Process and Case Evaluator Routine	Univ. Purdue și Colegiul Dartmouth	Fabricarea acidului sulfuric, etilenei, cauciucului sintetic.
SPEED-UP	Simulation Program for Economic Evaluation	Imperial College, Londra	Procese ipotetice
MULTI-BATCH	Computer Package for the Design of Multi Product Batch Plants	Technische Hochschule Zürich și Chevron Res, Co.	Inst. de fabricarea în campanii a mai multor produse (ex. medicamente cosmetice, lacuri etc.)

Continuare tabelul 1.1

Denumirea prescurtată	Numele întreg	Institutiile care l-a elaborat	Exemple de aplicații
SIMUL	-	Institutul de proiectări VEGYTERV, Budapesta	Procese de încălzire termică a hidrocarburilor
SIPT	Sistem de programe pentru simularea schemelor complexe interconectate	Centrul de calcul al Industriei Chimice-București	Creșteri termice, procese de separare a acestor componente
=====			

În sinteza optimă a sistemelor chimice s-au utilizat fie metode algoritmice (deterministe), fie metode euristice combinate cu tehnicile inteligenței artificiale. Rezultate practice mai importante s-au obținut în sinteza unor sisteme de operații unitare omogene, în special în sinteza rețelelor de transfer de căldură /6-8/ și anumite soluții orientative în sinteza rețelelor de separare /9-14/.

Pentru procese complexe, constituite din diferite operații unitare, rezultatele se referă fie la procese simple ipotetice /15, 16/, fie la alegerea schemei de reacție și eventuală prefigurare a schemei tehnologice /17 -21/.

Dezvoltarea mijloacelor de calcul a făcut deosebit de posibilă și trecerea la studiul dinamicii macrosistemelor (instalații complexe /53/). În general însă, abordarea este de multe ori tributară modului de lucru al inginerilor care au folosit cu precădere liniarizarea modelelor în vederea înlocuirii sistemelor cu ecuații diferențiale în ecuații algebrice folosind transformata Laplace (de ex. /22/). În ingineria sistemelor chimice liniarizarea oferă mai multe avantaje practice, dar poate fi și o sursă însemnată de erori.

Din punctul de vedere al complexității modelelor utilizate, în ingineria sistemelor chimice există o tendință tot mai accentuată de polarizare fie către modele de mare complexitate, fie către modele simplificate, de calcul rapid ("short-cut models"). Această polarizare este analogă și întrucâtva generată de cea din domeniul mijloacelor de calcul a căror producție se orientează tot mai mult pe fie către sisteme de calcul de mare capacitate și viteză, fie către mini-și microcalculatoare cu pret de cost scăzut și disponibile unui număr tot mai larg de specialiști din diferite sectoare de activitate.

## 2. SINTEZA OPTIMA A SISTEMELOR DE SEPARARE PRIN RECTIFICARE A AMESTECURILOR MULTICOMPONENTE

### 2.1. Cadrul general al problemei

Așa cum s-a menționat, problema sintezei optime a unui sistem corespunde cu determinarea structurii optime a sceluia în totalitatea înțelesului noțiunii de structură (elemente și relații între elemente); în cazul unui sistem industrial chimic aceasta implică:

- alegerea celor mai potrivite operații unitare și a utilajelor corespunzătoare;
- dimensionarea optimă a respectivelor utilaje;
- interconectarea optimă a acestora.

Sistemul complex corespunzător unei instalații industriale chimice poate fi descompus în următoarele trei mari sub-sisteme:

- subsistemul de condiționare a materiilor prime
- subsistemul de reacție
- subsistemul de separare.

Rolul ultimului subsistem constă în separarea efluenților subsistemului de reacție în produși de puritate impusă și materii prime nereacționate ce urmează a fi recirculate către subsistemele de condiționare și reacție.

În conformitate cu obiectivele sintezei optime a oricărui sistem în general, sinteza optimă a unui subsistem de separări implică alegerea celor mai adecvate metode de separare și a utilajelor corespunzătoare, precum și dimensionarea optimă a acestora și a conexiunilor dintre ele.

Complexitatea acestei probleme se reduce în situațiile în care experiența practicii fixează ca date anumite procedee de separare. Astfel, într-o serie de cazuri separarea componentelor pe baza diferenței de volatilitate, respectiv

rectificarea, constituie pe baza diferitelor considerente, singura metodă deznă de lăst în considerare. Chiar și cu această reducere, complexitatea respectivei probleme este deosebită fiind necesar de stabilit o secvență optică de elemente dimensionate la rîndul lor optim. Astfel, separarea completă a unui amestec de  $N$  componente implică  $N-1$  etape de separare prin a căror combinare rezultă următorul număr /12/ de secvențe,  $n_{sc}$ , respectiv de scheme tehnologice diferite:

$$n_{sc} = \frac{[2(N-1)]!}{N! (N-1)!} \quad (2.1)$$

În calculul respectiv s-au considerat secvențele uzuale formate din coloane cu o singură alimentare și doi efluenți, de vîrf și blaz, nu și cazul celor cu alimentări și evacuări multiple. Asupra acestor aspecte se va reveni mai pe larg în cap. 2.6.

Simplificarea pe care o aduce considerarea numai unui anumit tip de separare rezultă din faptul că în cazul concurenței a  $S$  tipuri de procedee de separare (ex. rectificare, cristalizare, absorbție, extracție etc.) numărul de secvențe posibile se multiplică cu  $S^{N-1}$ .

Soluția completă la sinteza unui sistem de separare prin rectificare a unui amestec multicomponent constă atât în determinarea secvenței optime de separări, cît și în dimensionarea optimă a elementelor componente ale sistemului: coloane de rectificare, condensatoare, reținerătoare, preîncălzitoare. În această ordine de idei majoritatea lucrărilor existente pînă în prezent în literatură, din care câteva au fost menționate în capitolul introductiv, urmăresc cu precădere stabilirea unei cît mai favorabile secvențe de separări apelînd pentru aceasta la metode euristice (/9/, /11/) sau algoritmice (/10/, /12/, /13/).

La nivelul proiectării optime a elementelor variabile con-

siderate sînt rapoartele de reflux și eventual stările termice ale alimentărilor coloanelor. În unele cazuri (/10/) presiunile de lucru la coloane sînt selectate din cadrul cîtorva valori prestabilite.

În lucrările citate aparatele de transfer termic sînt doar predimensionate pe baza atribuirii unor valori uzuale pentru coeficienții totali de transfer termic; aceasta se face doar în scopul estimărilor respectivelor cheltuieli de amortizare ce intervin în funcția obiectiv globală a întregului sistem. Respectivul abordări implică deci o serie de ipoteze simplificatoare care pe lângă faptul că nu dau rezolvări detaliate pentru proiectare, pot conduce și la soluții suboptimale, tributare valorilor mărimilor prestabilite.

## 2.2. Prefigurarea modului de abordare

Considerentele principale care au condus la metoda originală ce va fi expusă în cele ce urmează sînt :

a) În raport cu o funcție obiectiv globală a întregului sistem, trebuie să considerate ca variabile sînt mărimile ce definesc legăturile între elemente cît și totalitatea celor care caracterizează intrinsec respectivele elemente. Cu alte cuvinte, o soluție optimă exactă pentru o problemă de sinteză nu poate fi obținută decît prin stabilirea unor relații optime între elemente optim dimensionate la rîndul lor în raport cu obiectivul global. Evident că a constitui un sistem optim prin cea mai bună îmbinare de elemente optime nu este privită ca o simplă însumare de soluții, ci ca o intercorelare a deciziilor locale (la nivel de element) cu cele globale (la nivel de sistem).

Concret, la sinteza optimă a sistemelor de separare prin rectificare a amestecurilor multicomponente se va urmări să se stabilească secvența de separare, cît și dimensionarea tehnologică detaliată a utilajelor în această secvență, care să con-

1.94861.556

duce la o soluție globală optimă în raport cu un anumit obiectiv.

b) În general în ingineria chimică numărul de componente (sau de fracțiuni) separați printr-o secvență de coloane de rectificare nu este mai mare ca 5-6. În consecință, numărul de secvențe posibile, calculat în baza relației (2.1) nu este excesiv. Astfel pentru  $N = 4$ ,  $n_s = 5$ , pentru  $N = 5$ ,  $n_s = 14$ , pentru  $N = 6$ ,  $n_s = 42$ . În consecință problema de sinteză ar putea fi transformată într-o explorare exhaustivă a soluțiilor optime pentru fiecare secvență în parte.

Obținerea soluției optime corespunzătoare unei anumite secvențe late implică însă rezolvarea unei probleme de optimizare cu un număr foarte mare de variabile și cu un număr considerabil de ecuații neliniare între acestea. Abordarea acesteia ca o problemă clasică de optimizare a unui sistem nelinier nu este posibilă în condițiile actuale ale tehnicii de calcul.

În consecință, în prezenta lucrare se propune ca modalitate de lucru elaborarea de modele simplificate pentru calculul optim al elementelor componente ale sistemului și utilizarea lor în continuare pentru obținerea soluției globale optime corespunzătoare fiecărei secvențe posibile de separare. Sublinierea cuvântului optim în fraza anterioară se datorează faptului că pînă în prezent în literatură de inginerie chimică exista cu precădere modele de calcul rapid pentru dimensionări tehnologice și mai puțin pentru obținerea unor soluții optime.

În prezenta lucrare s-au utilizat ca modalități de elaborare a respectivelor modele următoarele căi:

- metode numerice directe: corelarea prin regresie a unor soluții optime exacte obținute cu ajutorul simulării și metodelor directe de optimizare (este cazul modelului de calcul optim al coloanelor de rectificare).

- metode analitice: obținerea printr-o tratare teoretică



corespunzătoare a relațiilor pentru calculul valorilor optime ale variabilelor implicate (este cazul modelelor pentru calculul optim al condensatoarelor și rețierbătoarelor).

c) Tratarea modulară a problemei de sinteză abordează necesită formularea a priori a unui criteriu unitar pentru selecția soluțiilor optime. În acest scop s-a ales minimizarea cheltuielilor totale implicate, atât la nivel de element, cât și la nivel de sistem.

### 2.3. Elaborarea unui model simplificat pentru calculul optim al coloanelor de rectificare

Pentru realizarea separării prin rectificare a unui amestec cu debit și compoziție date în efluenți deosemeni prestabiliti pot fi determinate o infinitate de soluții de proiectare cuprinse în cele două limite teoretice de funcționare:

- funcționarea la reflux minim, în care caz coloana de rectificare trebuie să aibă un număr infinit de talere teoretice pentru a realiza gradul de separare cerut;

- funcționarea la reflux total, în care caz coloanei de rectificare îi corespunde un număr minim de talere teoretice, dar și o producție nulă.

Stabilirea valorii debitului de reflux pentru care soluția de proiectare este optimă în raport cu un anumit criteriu a constituit una din primele probleme de optimizare studiate în ingineria chimică.

În cele ce urmează se expune modul de stabilire a unor expresii analitice ce permit o evaluare rapidă a refluxului optim fără a mai fi necesară rezolvarea respectivei probleme de extrem.

Pentru stabilirea respectivelor relații s-a rezolvat inițial pentru diferite seturi de date problema determinării refluxului optim în raport cu criteriul minimizării cheltuielilor totale implicate de procesul de rectificare. Aceasta a permis iden-



tificarea parametrilor semnificativi care intervin în stabilirea refluxului optim și corelarea lor în expresii analitice, a căror testare a arătat existența unor concordanțe satisfăcătoare între valorile estimate și cele exacte.

Având în vedere frecvența mult mai mare în procesele de rectificare a coloanelor cu talere față de cele cu umplură (ce sînt utilizate de obicei în situații speciale /27/) în cele ce urmează se abordează și subînțelege numai acest tip constructiv.

Analiza procesului de rectificare impune considerarea următoarelor categorii de cheltuieli:

- $C_1$  - cheltuieli de amortizare a investiției corespunzătoare coloanei de rectificare
- $C_2$  - cheltuieli de amortizare a investiției corespunzătoare condensatorului
- $C_3$  - cheltuieli de amortizare a investiției corespunzătoare rețierbătorului
- $C_4$  - cheltuieli cu agentul de răcire circulat în condensatorul coloanei (inclusiv energia necesară pomparea acestuia)
- $C_5$  - cheltuieli cu agentul de încălzire utilizat în rețierbător.

Alte categorii de cheltuieli, cum sînt cele cu forța de muncă, fiind constante în raport cu debitul de reflux nu este necesar a fi introduse în funcția obiectiv, deși contribuie cu o cotă-parte la valoarea cheltuielilor totale.

Folosind formulele uzuale /23/ de exprimare a costului utilajelor în raport cu dimensiunile caracteristice se obține:

$$C_1 = R_{em} \cdot a_1 \cdot D^{b_1} \cdot N^{b_1} \quad (2.2)$$

$$C_2 = R_{em} \cdot a_2 \cdot A_0^{b_2} \quad (2.3)$$

$$C_3 = R_{em} \cdot a_3 \cdot A_r^{b_3} \quad (2.4)$$

cu următoarele semnificațiile notatiilor:

- $a_1 - a_3$  - constante de cost ( $\text{lei/m}^{b_1}$ ,  $\text{lei/m}^{2 \cdot b_2}$ ,  $\text{lei/m}^{2 \cdot b_3}$ )  
 $b_1 - b_3$  - exponenți de cost  
 $R_{em}$  - rata anuală de amortizare a instalației de rectificare ( $\text{an}^{-1}$ )  
 $D$  - diametrul coloanei de rectificare  
 $N$  - numărul de talere reale al coloanei de rectificare  
 $A_0$  - suprafața ariei de transfer termic a condensatorului ( $\text{m}^2$ )  
 $A_f$  - suprafața ariei de transfer termic a rețierbătorului ( $\text{m}^2$ )

În cele ce urmează se vor folosi pentru exponenți de cost valorile medii indicate în literatură /23/:

$$b_1^i = 0,9 \quad b_1^n = 1,2 \quad b_2 = b_3 = 0,6$$

Expresiile celorlalte categorii de cheltuieli sînt :

$$C_4 = 3600 H G_a c_a \quad (2.5)$$

$$C_5 = 3600 H G_A c_A \quad (2.6)$$

unde:

$H$  - numărul anual de ore de funcționare a instalației de rectificare (ore/an)

$G_A$  - debitul de agent de încălzire în rețierbător ( $\text{kg/s}$ )

$G_a$  - debitul de agent de răcire în condensator ( $\text{kg/s}$ )

$c_A$  - costul unitar al agentului de încălzire ( $\text{lei/kg}$ )

$c_a$  - costul unitar al agentului de răcire, inclusiv cheltuielile unitare cu energia de pompare a acestuia ( $\text{lei/kg}$ )

Intrucît cel mai frecvent ca agent de încălzire se utilizează aburul saturat, iar ca agent de răcire apa, se va considera că la încălzire se implică doar călduri latente, iar la răcire doar călduri sensibile.

Din bilanțul termic global al coloanei, neglijînd pierderile de căldură în exterior se pot calcula debitele de agenți

consumate în funcție de producția de distilat și raportul de reflux:

$$G_A = P (R+1) \frac{r_D}{r_A} M_A \quad (2.7)$$

$$G_B = \frac{P (R+1) r_D}{c_s (T_e - T_1)} \quad (2.8)$$

unde s-au făcut următoarele notații:

P - producția de distilat a coloanei (Kmol/s)

R - raportul dintre debitul de reflux și cel de distilat  
(raportul de reflux)

$r_A$  - căldura latentă de vaporizare a agentului de încălzire  
(J/Kmol)

$r_D$  - căldura latentă de vaporizare a distilatului (J/Kmol)

$M_A$  - masa moleculară a aburului (kg/kmol)

$c_s$  - căldura specifică medie a agentului de răcire (J/kg grad)

$T_e$  - temperatura agentului la ieșirea din condensator ( $^{\circ}$ C)

$T_1$  - temperatura agentului la intrarea în condensator ( $^{\circ}$ C)

Folosind relațiile anterioare rezultă următoarea expresie a cheltuielilor totale  $G_T$ :

$$G_T = R_{am} \left[ a_1 D^{0,6} N^{1,2} + a_2 A_c^{0,6} + a_3 A_f^{0,6} \right] + 3600 P (R+1) \frac{r_D}{r_A} H \left[ \frac{r_A}{c_s (T_e - T_1)} c_s + M_A c_A \right] \quad (2.9)$$

Expresia  $H \left[ \frac{r_A}{c_s (T_e - T_1)} c_s + M_A c_A \right]$  reprezintă o sumă

de costuri ale utilităților și va fi notată cu  $S_{cu}$ . În scopul definirii unor rapoarte de costuri se împarte relația anterioară cu această expresie, obținându-se următoarea funcție obiectiv

$$f = Z_1 D^{0,6} N^{1,2} + Z_2 A_c^{0,6} + Z_3 A_f^{0,6} + 3600 P (R+1) \frac{r_D}{r_A} \quad (2.10)$$

unde  $Z_1 = R_{am} \cdot a_1 / S_{cu}$ ,  $Z_2 = R_{am} a_2 / S_{cu}$  și  $Z_3 = R_{am} a_3 / S_{cu}$ .

Deci  $Z_1$  reprezintă raportul între costul unitar de amortizare al coloanei și costurile utilităților, iar  $Z_2$  și  $Z_3$  rapoarte între costurile unitare de amortizare a condensatorului și res-

pectiv referbătorului și costurile utilităților. Utilizarea de rapoarte de costuri, adimensionale, reduce numărul de parametri investigați pentru influența lor asupra refluxului optim.

În expresia funcției obiectiv (2.10) apar o serie de mărimi a căror dependență în raport cu debitul de reflux poate fi exprimată prin intermediul unor modele matematice mai mult sau mai puțin complexe.

În contextul de față este necesară alegerea unui model cât mai simplu, care să permită un cât mai mare număr de simulări în scopul stabilirii valorii refluxului optim în diferite condiții de lucru. În consecință numărul de talere al coloanei se determină pe baza numărului de talere teoretice:

$$N = N_T/E \quad (2.11)$$

unde  $E$  reprezintă eficacitatea medie a telerului, iar  $N_T$  numărul de talere teoretice, acesta fiind stabilit în baza metodei Gilliland. Astfel, conform acesteia, dacă se notează cu:

$$A = \frac{R - R_{\min}}{R + 1} \quad (2.12)$$

$$B = \frac{S - S_{\min}}{S + 1} \quad (2.13)$$

unde  $S$  este numărul de unități de transfer teoretice (fiind egal cu  $N_T + 1$  sau  $N_T + 2$  după cum se lucrează cu condensator total, respectiv parțial), iar  $R_{\min}$  și  $S_{\min}$  sînt valorile minime pentru  $R$  și  $S$ . Între mărimile  $A$  și  $B$  există următoarea dependență /24/:

$$B = 0,5039 - 0,5968 A - 0,0908 \log A \quad (2.14)$$

$$\text{pentru } 0,0078 < A \leq 0,125$$

$$B = 0,6257 - 0,9868 A + 0,516 A^2 - 0,1738 A^3 \quad (2.15)$$

$$\text{pentru } 0,125 < A \leq 1$$

Diamestrul coloanei se stabilește pe baza impunerii unei viteze fictive a vaporilor raportată la secțiunea liberă a coloanei, respectiv :

$$D = \sqrt{\frac{4 Q_v}{\pi W}} \quad (2.16)$$

$$\text{iar : } Q_v = \frac{22,4}{3600} P(R+1) \frac{T_m + 273}{273} \cdot \frac{760}{P_m} \quad (2.17)$$

unde:

$W$  - viteza fictivă a vaporilor raportată la secțiunea liberă a coloanei (m/s)

$Q_v$  - debitul volumetric mediu de vapori din coloană (m<sup>3</sup>/s)

$T_m$  - temperatura medie a vaporilor din coloană (°C)

$P_m$  - presiunea medie a vaporilor din coloană (torr)

Impunerea unei valori pentru viteza fictivă a vaporilor raportată la secțiunea liberă a coloanei nu reprezintă practic introducerea unei decizii arbitrare. În funcție de tipul constructiv de teler și condițiile hidrodinamice (viteza de înecare) există valori optime determinate experimental pentru acest parametru.

Suprafețele ariilor de transfer ale condensatorului și reîncălzitorului se stabilesc în baza unor valori atribuite pentru coeficienții totali de transfer de căldură  $K_c$  și  $K_f$ . În acest stadiu al abordării problemei aceste atribuiri nu au efecte criticabile întrucât așa cum va rezulta din cele ce urmează termenii respectivi sînt practic constanți la variația raportului de reflux. În consecință:

$$A_c = \frac{P(R+1) \Gamma_D}{K_c \Delta T_{m_c}} \quad (2.18)$$

$$A_f = \frac{P(R+1) \Gamma_D}{K_f \Delta T_{m_f}} \quad (2.19)$$

unde diferențele medii de temperatura din condensator  $\Delta T_{m_c}$  și reîncălzitor  $\Delta T_{m_f}$  au expresiile :

$$\Delta T_{m_o} = \frac{T_e - T_1}{\ln \frac{T_D - T_1}{T_D - T_e}} \quad (2.20)$$

$$\Delta T_{m_f} = T_A - T_W \quad (2.21)$$

$T_D$  și  $T_W$  reprezentînd temperaturile de condensare și fierbere a distilatului și rezidului, iar  $T_A$  temperatura de condensare a agentului de încălzire.

Pentru separarea unui anumit amestec (pentru care deci  $N_{min}$ ,  $R_{min}$ ,  $T_D$ ,  $T_W$  și  $\sigma_D$  sînt date) în anumite condiții tehnologice deosebeni impuse (respectiv  $P$ ,  $W$ ,  $T_1$ ,  $T_e$ ,  $T_A$ ,  $\sigma_A$ ), pentru un anumit tip de taler propus ( $E$ ) și pentru valori uzuale ale costurilor unitare  $a_1$ - $a_3$ ,  $c_A$ ,  $c_s$  și mărimilor  $H$  și  $R_{sm}$ , funcția obiectiv (2.10) conține ca singură mărime variabilă valoarea raportului de reflux  $R$ . Intrucît stabilirea analitică a valorii optime a lui  $R$  nu este posibilă, este necesară utilizarea unei metode numerice corespunzătoare. În acest sens se pot utiliza fie metode de eliminare de intervale, fie de interpolare-extrapolare. În cadrul lucrării de față s-a folosit metoda eliminării cu rația "secțiunii de aur" respectiv subrutine EXONID elaborată de autor și expusă și în lucrarea /25/.

S-au identificat într-o primă etapă parametrii care influențează într-o măsură semnificativă valoarea debitului optim de reflux. În consecință, s-a studiat influența următoarelor mărimi asupra refluxului optim: rapoartele de costuri  $Z_1$  -  $Z_3$ , sarcinile termice ale condensatorului și reîncălzitorului, respectiv  $q_c = K_c \cdot \Delta T_{m_o}$  și  $q_r = K_r \cdot \Delta T_{m_f}$ , căldura latentă de vaporizare a distilatului  $\sigma_D$ , viteza fictivă a vaporilor  $w$ , producția de distilat  $P$ , refluxul minim  $R_{min}$  și numărul minim de talere teoretice  $N_{min}$ .

Pentru fiecare din aceste mărimi s-a ales un domeniu de variație suficient de mare pentru a cuprinde practic întreaga

gemă a proceselor industriale de rectificare. În cadrul studierii influenței separate a fiecărui parametru asupra raportului dintre refluxul optim și cel minim (cifra optimă de reflux) ceilalți parametri au fost menținuți la valorile de referință, corespunzătoare celor mai frecvente valori întâlnite în practică. Pașii de variație au fost suficient de reduși, astfel încât dependența cifrei optime de reflux cu respectivii parametri să poată fi reprezentată cât mai corect.

Valorile minime, maxime și de referință, precum și pașii de variație ai respectivelor parametri sunt expuse în tab.2.1. iar în anexă sunt prezente și programele de calcul și rezultatele complete.

Tabelul 2.1.

Parametri	Unitatea de măsură	Valoarea minimă	Valoarea maximă	Val. de referință	Pașul de variație
Z <sub>1</sub>	Kmol dist/ (h.m <sup>b1</sup> )	0,220	0,550	0,335	0,015
Z <sub>2</sub>	Kmol dist/ (h.m <sup>2 b2</sup> )	0,170	0,410	0,230	0,015
Z <sub>3</sub>	Kmol dist/ (h.m <sup>2 b3</sup> )	0,170	0,410	0,230	0,015
q <sub>o</sub>	W/m <sup>2</sup>	6978	27912	13956	1163
q <sub>f</sub>	W/m <sup>2</sup>	6978	27912	13956	1163
D	K/Kmol dist.	2,512.10 <sup>7</sup>	4,187.10 <sup>7</sup>	2,931.10 <sup>7</sup>	2,093.10 <sup>6</sup>
W	m/s	0,1	1	0,5	0,1
P	Kmol dist/s	5,55.10 <sup>-4</sup>	5,55.10 <sup>-3</sup>	2,78.10 <sup>-3</sup>	2,78.10 <sup>-4</sup>
R <sub>min</sub>	-	0,5	5,1	2	0,2
N <sub>min</sub>	-	2	40	20	2

Rezultatele obținute (prezentate și în cadrul lucrării /26/ sunt următoarele : variația parametrilor Z<sub>2</sub>, Z<sub>3</sub>, q<sub>c</sub> și q<sub>f</sub> nu influențează valoarea cifrei optime de reflux. Influența celorlal-



rile 2.1-2.6. Astfel, în fig. 2.1 se observă că pe măsura creșterii costului unitar de amortizare a coloanei în raport cu cel al utilităților (raportul  $Z_1$ ) este necesar a se lucra la cifre de reflux mai ridicate care conduc la o scădere a numărului de talere necesare.

În condițiile în care căldura latentă a distilatului este ridicată, datorită creșterii necesarului de utilități, cifra de reflux trebuie micșorată (fig. 2.2).

Creșterea vitezei fictive a vaporilor, conducând la micșorarea diametrului coloanei reduce valoarea optimă a cifrei de reflux (fig. 2.3), iar creșterea producției de distilat implică reducerea acesteia (fig. 2.4), fapt explicabil prin ponderea progresiv mai mare a cheltuielilor cu utilitățile față de cele de amortizare.

La valori mai ridicate ale raportului minim de reflux este necesar a se lucra la valori mai mici ale cifrei de reflux (fig. 2.5) pentru a nu se obține valori prea mari ale debitului de vapori, însoțite de o creștere corespunzătoare a cheltuielilor cu utilitățile.

Situațiile în care numărul de talere teoretice este mare (corespunzătoare unor grade de separare înaintată și/sau unor separări de amestecuri cu volatilitatea relativ redusă) conduc la cifre optime de reflux mai ridicate așa cum se observă și în fig. 2.6.

Rezultă deci dependența :

$$\frac{R_{opt}}{R_{min}} = f(Z_1, \gamma_D, P, w, R_{min}, N_{min}) \quad (2.22)$$

Intrucât panta medie a curbei variației raportului  $R_{opt}/R_{min}$  cu  $Z_1$  este 0,57, iar cea cu  $\gamma_D$  este - 0,6, cei doi parametri pot fi reuniți sub forma unui raport.

Este evident că variația lui  $R_{opt}/R_{min}$  în raport cu  $\gamma_D$



**Fig.2 .1. Influența raportului  $Z_1$  asupra cifrei optime de reflux.**

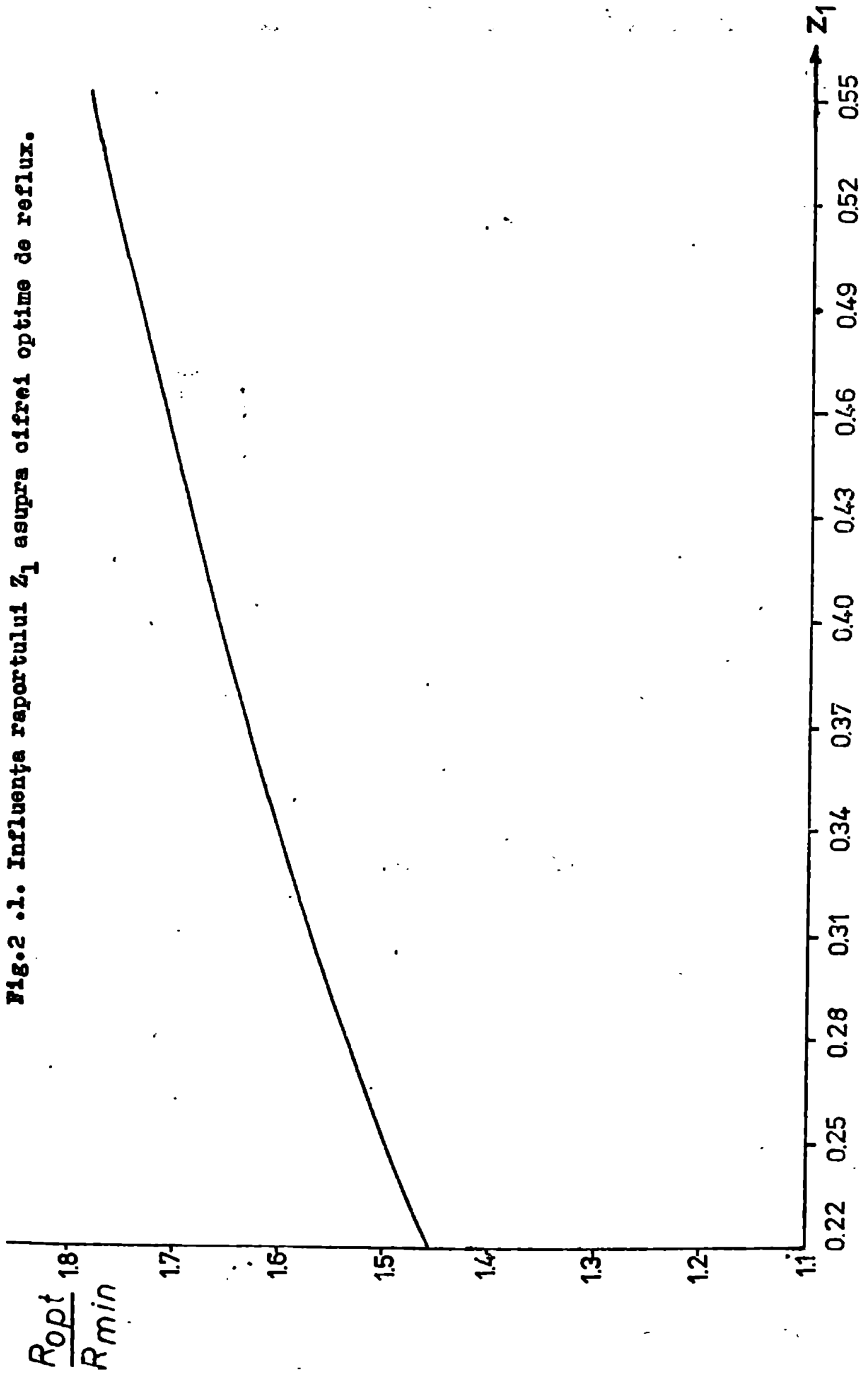
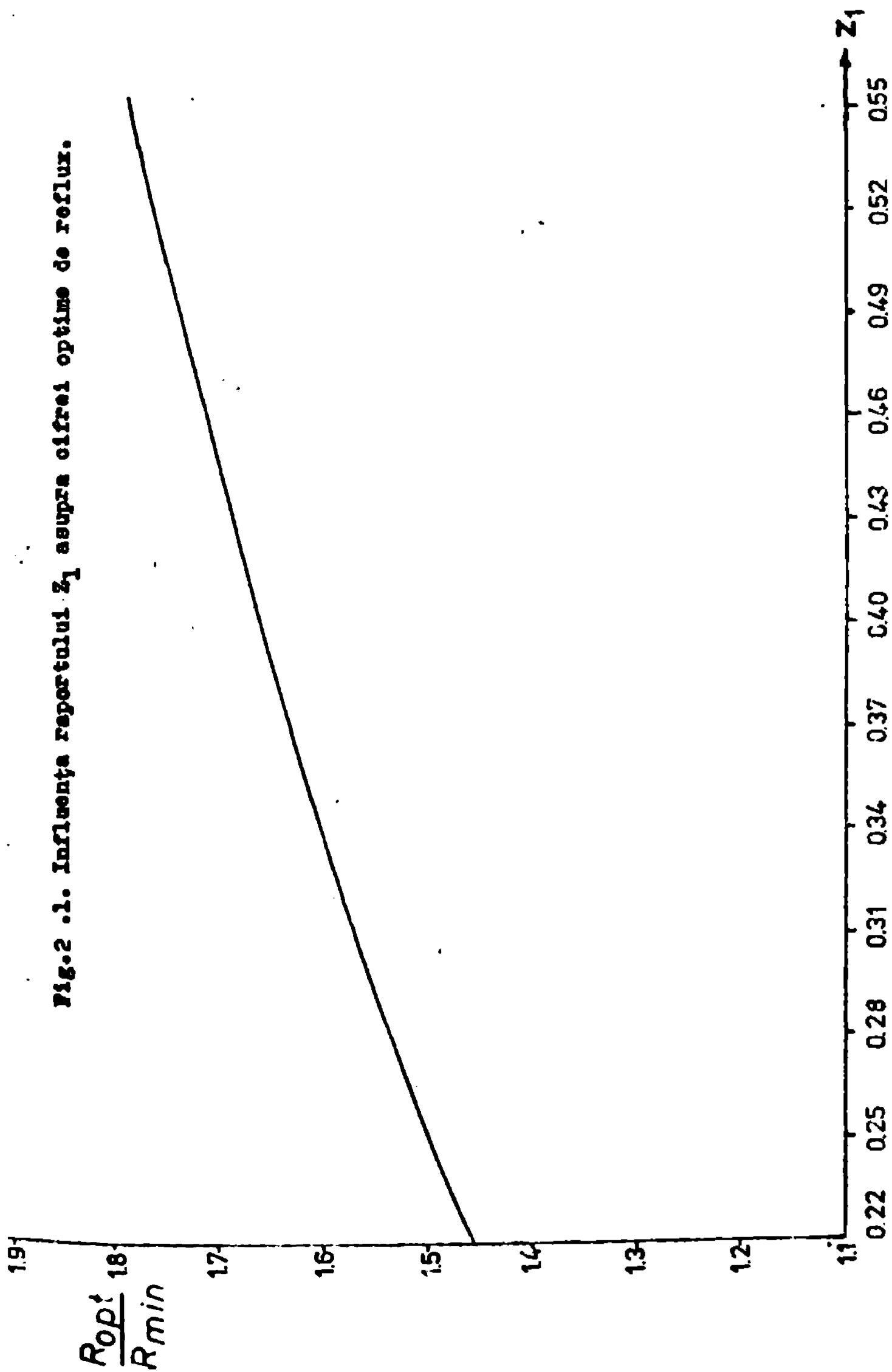


Fig.2 .1. Influența raportului  $Z_1$  asupra cifrei optime de reflux.



$\frac{R_{opt}}{R_{min}}$

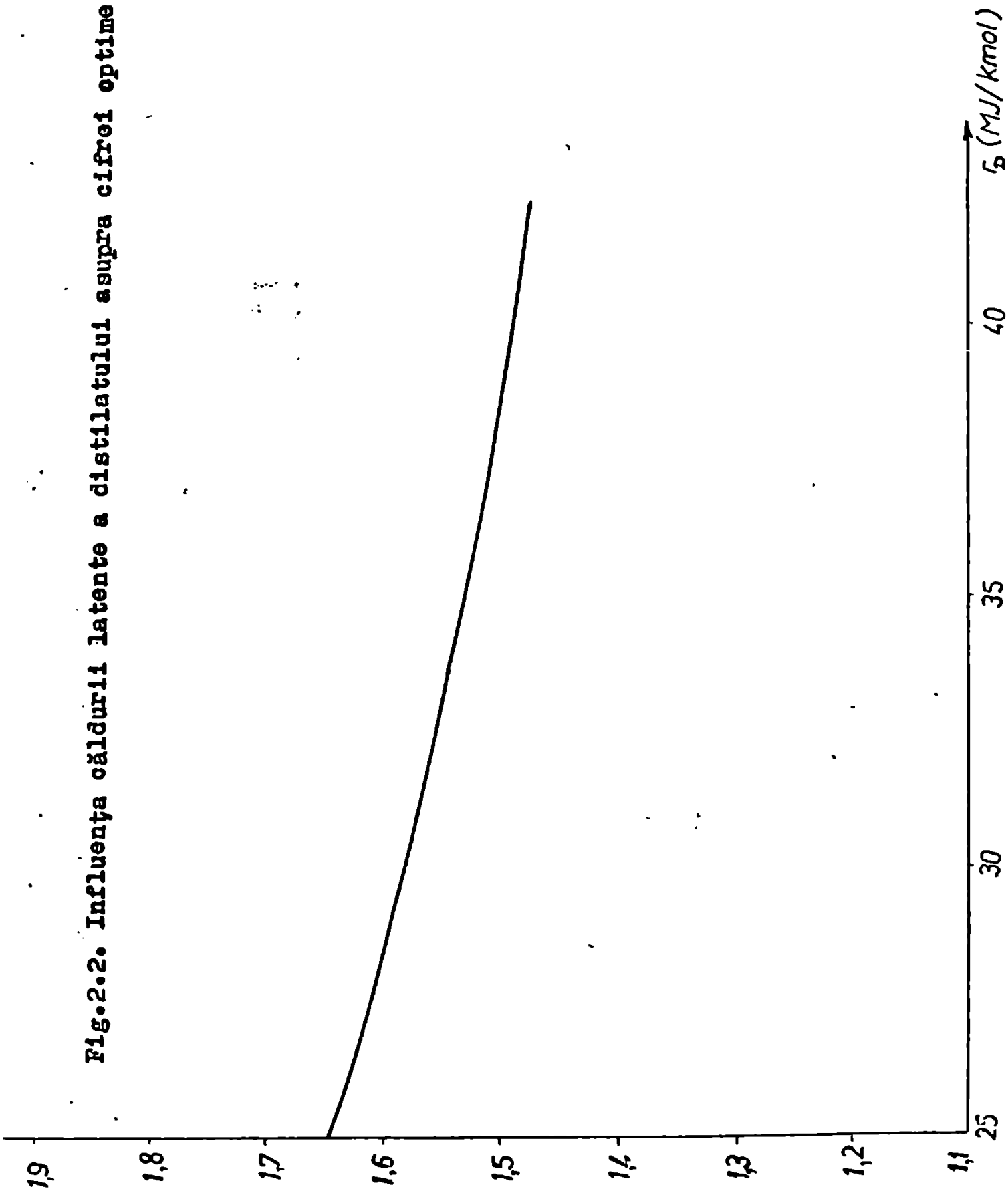


Fig.2.2. Influența oăldurii latente a distilatului asupra cifrei optime de reflux.

$\frac{R_{opt}}{R_{min}}$

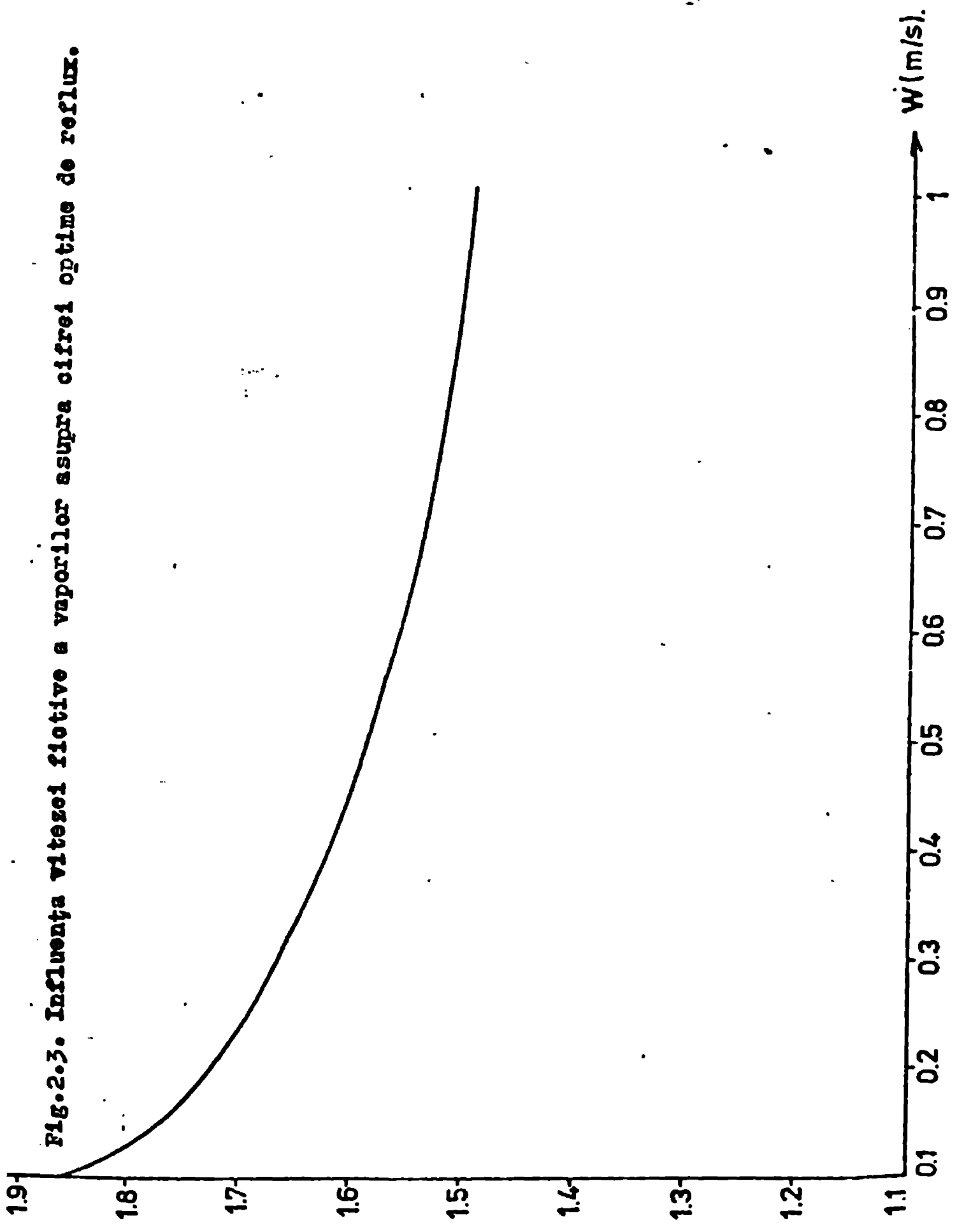


Fig.2.3. Influența vitezei fiotive a vaporilor asupra cifrei optime de reflux.

Fig.2.4. Influența producției de distilat asupra cifrei optime de reflux.

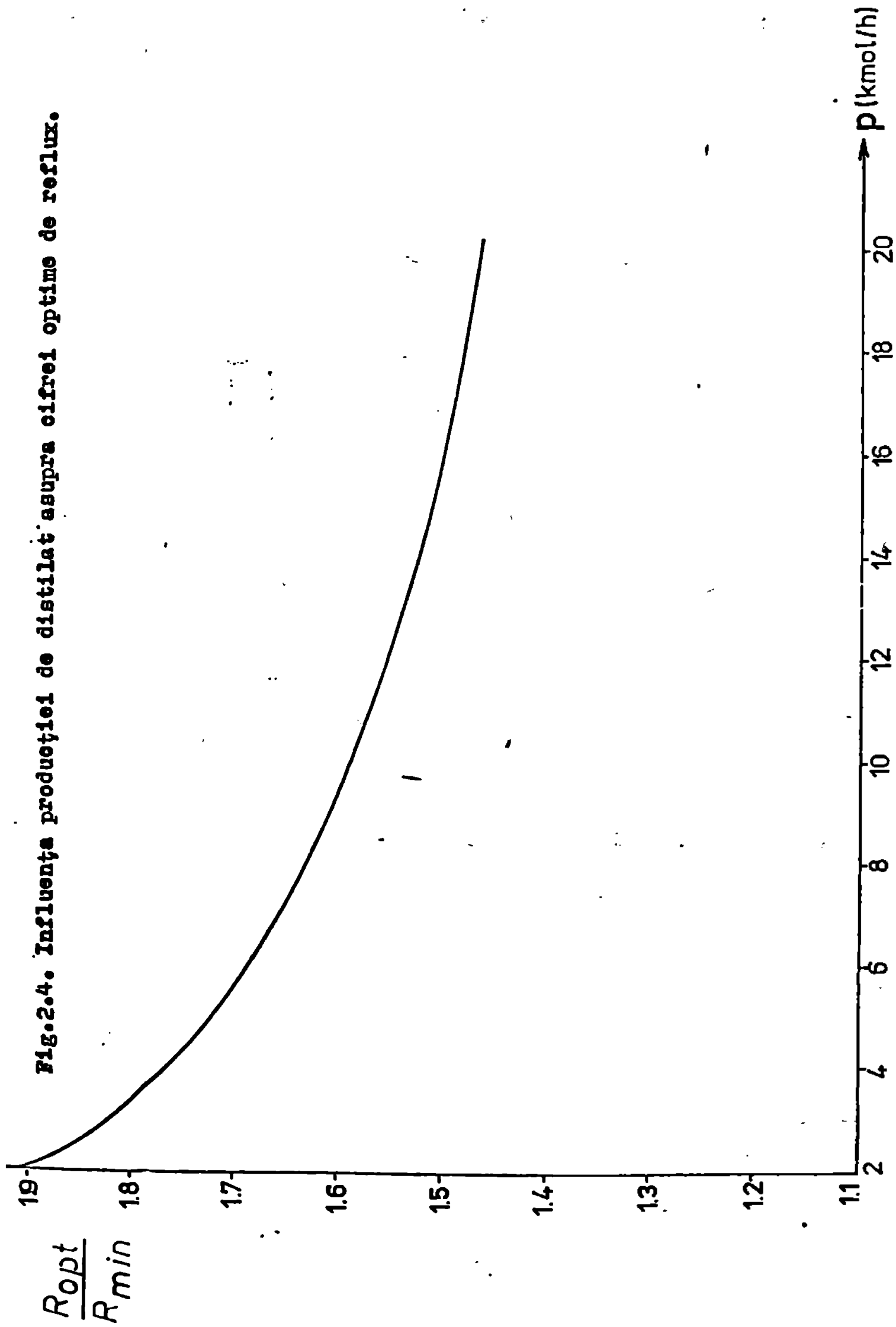
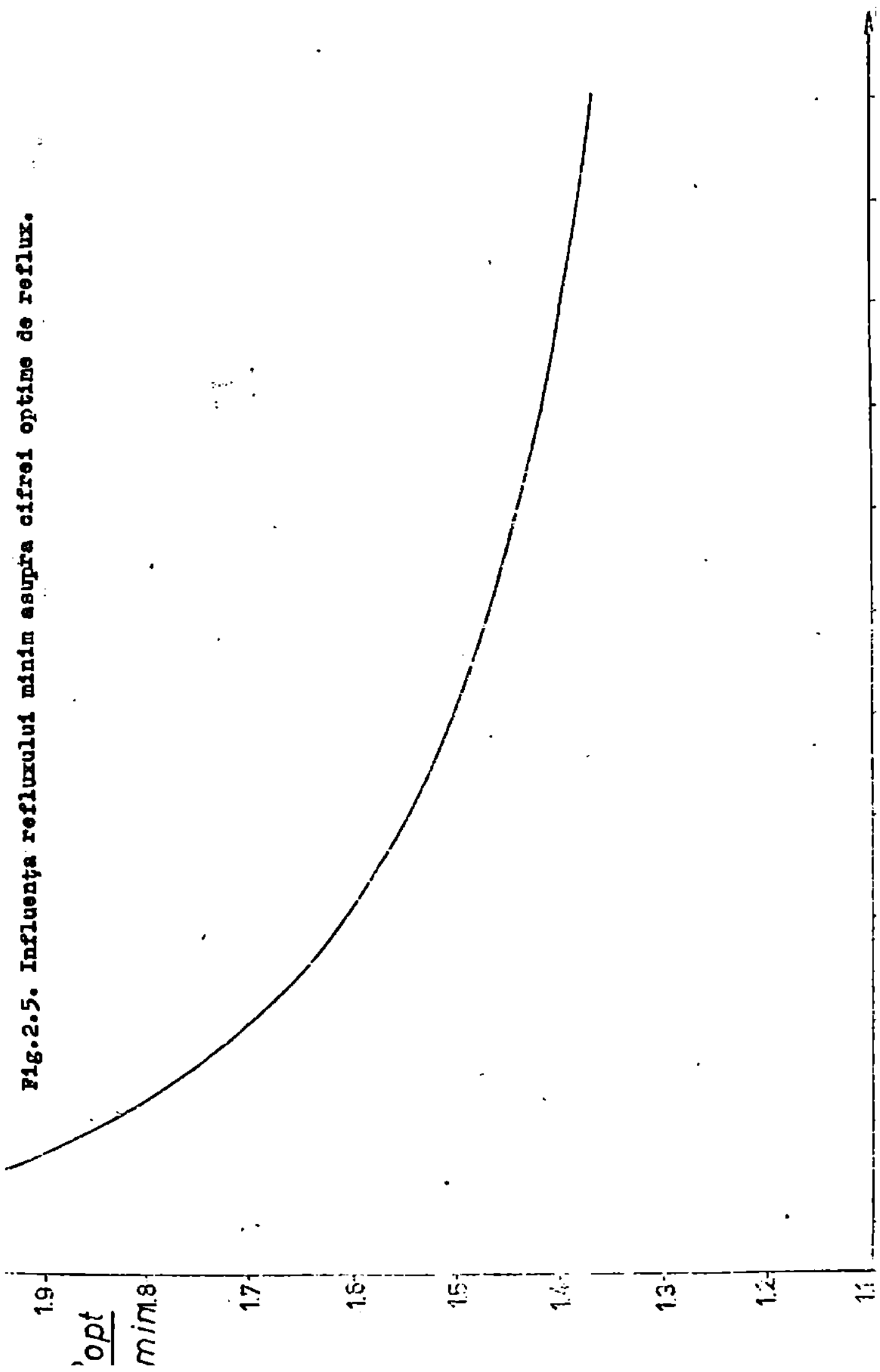


Fig.2.5. Influența refluxului minim asupra cifrei optime de reflux.



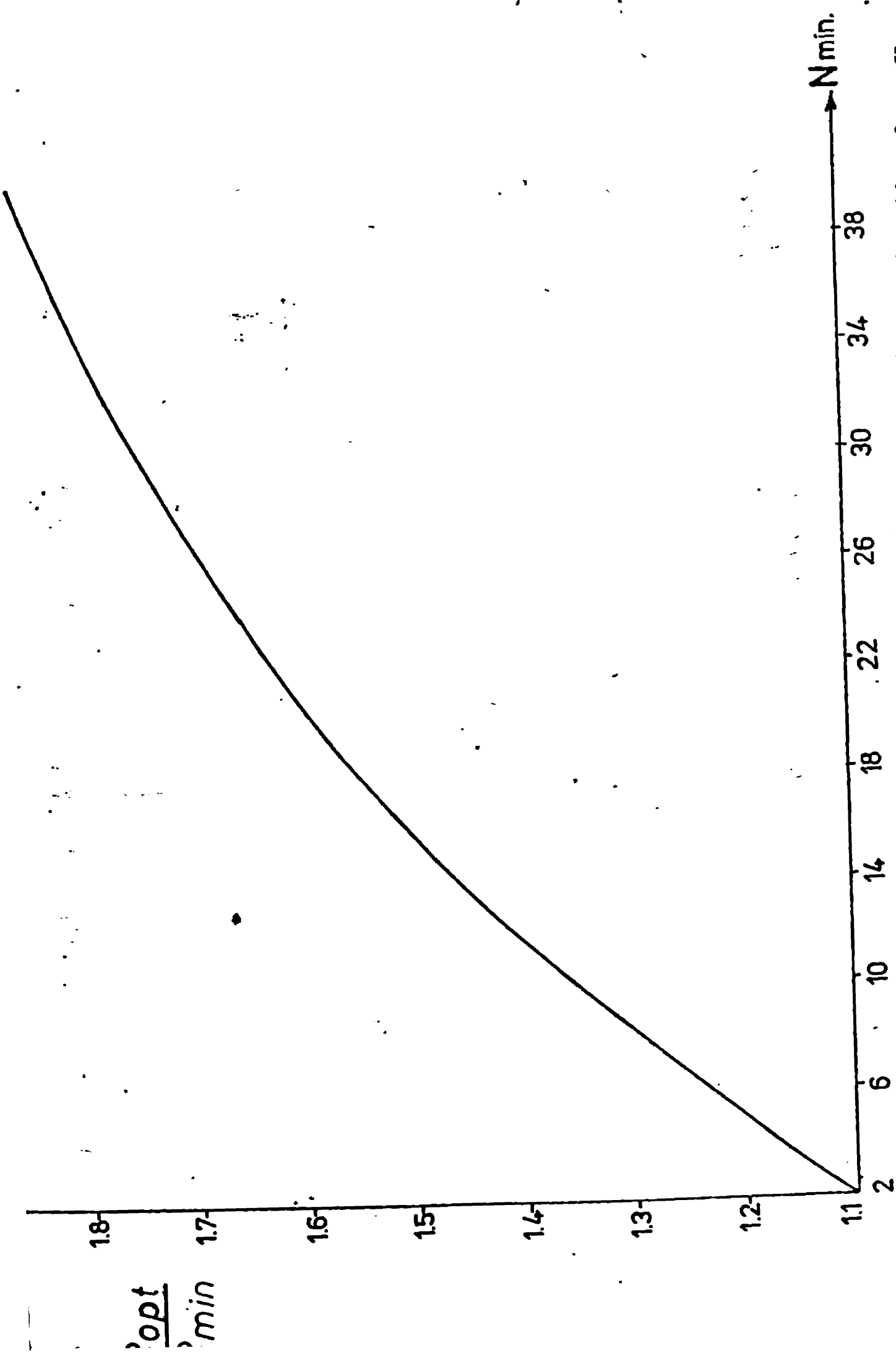


Fig.2.6. Influența numărului minim de talere teoretice asupra cifrei optime de reflux.

va fi inversă față de cea în raport cu  $\Gamma_D$ . Luînd în considera-  
re și influența eficienței telerului E asupra cifrei optime de  
reflux (ridicată la puterea  $b_1^n = 1,2$ , vezi relațiile (2.2) și  
(2.11)) s-a definit următorul grup de parametri

$$K = \frac{Z_1 \Gamma_A}{E^{1,2} \Gamma_D} \quad (2.23)$$

(ale cărei unități de măsură sînt cele ale lui  $Z_1$ ) și s-a propus  
relația:

$$\frac{R_{opt}}{R_{min}} = x_1 + x_2 K^{x_3} N_{min}^{x_4} R_{min}^{x_5} P^{x_6} W^{x_7} \quad (2.24)$$

Pentru calculul celor mai satisfăcătoare valori ale necu-  
noscutelor  $x_1-x_7$  s-a minimizat următoarea sumă a abaterilor pă-  
tratice

$$S_{sp} = \sum_{j=1}^{120} \left[ \left( \frac{R_{opt_j}}{R_{min_j}} \right)_{exact} - \left( \frac{R_{opt_j}}{R_{min_j}} \right)_{estimat} \right]^2 \quad (2.25)$$

În relația anterioară valorile exacte sînt cele obținute  
prin rezolvarea numerică corespunzătoare a problemei refluxului  
optim, iar cele estimate sînt valorile furnizate de relația (2.24).  
Ca valori exacte ale raportului  $R_{opt}/R_{min}$  s-au utilizat 104 din  
punctele din figurile 2.1-2.6 și 16 valori corespunzătoare unui  
experiment factorial ortogonal  $2^4$ , unde cei 4 factori sînt: K,  
grupul P; W,  $R_{min}$  și  $N_{min}$ . Experimentul expus în tabelul 2.2  
urmărește diversificarea setului de date pentru analiza de re-  
gresie, cu valori ale cifrei optime de reflux corespunzătoare  
unor combinații extreme ale parametrilor implicați.

Determinarea valorilor lui  $x_1-x_7$  din relația (2.24) ce  
minimizează fracția (2.25) s-a făcut cu ajutorul metodei Davidon-  
Fletcher-Powell, respectiv subrutina DFP elaborată de autor și ex-  
pusă deasemeni și în lucrarea /25/. Aplicarea acestei eficiente



Tabelul 2.2

Factor Nr. experiment	K	P; w	R <sub>min</sub>	N <sub>min</sub>	R <sub>opt</sub> /R <sub>min</sub>
1	0,4817	5,55.10 <sup>-4</sup> ; 0,1	0,5	2	1,6740
2	0,4817	5,55.10 <sup>-3</sup> ; 1	0,5	2	1,0770
3	0,4817	5,55.10 <sup>-4</sup> ; 0,1	5,1	2	1,1317
4	0,4817	5,55.10 <sup>-3</sup> ; 1	5,1	2	1,0156
5	0,4817	5,55.10 <sup>-4</sup> ; 0,1	0,5	40	3,5117
6	0,4817	5,55.10 <sup>-3</sup> ; 1	0,5	40	1,9602
7	0,4817	5,55.10 <sup>-4</sup> ; 0,1	5,1	40	1,8166
8	0,4817	5,55.10 <sup>-3</sup> ; 1	5,1	40	1,2092
9	1,964	5,55.10 <sup>-4</sup> ; 0,1	0,5	2	2,7334
10	1,964	5,55.10 <sup>-3</sup> ; 1	0,5	2	1,2866
11	1,964	5,55.15 <sup>-4</sup> ; 0,1	5,1	2	1,4401
12	1,964	5,55.10 <sup>-3</sup> ; 1	5,1	2	1,0571
13	1,964	5,55.10 <sup>-4</sup> ; 0,1	0,5	40	4,0600
14	1,964	5,55.10 <sup>-3</sup> ; 1	0,5	40	2,9707
15	1,964	5,55.10 <sup>-4</sup> ; 0,1	5,1	40	2,1262
16	1,964	5,55.10 <sup>-3</sup> ; 1	5,1	40	1,5649

metode de optimizare a fost posibilă întrucât expresiile analitice ale derivatelor funcției obiectiv sînt ușor de obținut. Atingerea minimumului  $S_{ap} = 1,84$  a necesitat 101 iterații, respectiv 984 evaluări ale funcției obiectiv (listarea programului și rezultatele complete sînt în anexă).

Înlocuind în relație (2.24) valorile  $x_1-x_7$  astfel stabilite s-a obținut expresia :

$$\frac{R_{opt}}{R_{min}} = 0,74 + 0,4135 \frac{K^{0,3435} N_{min}^{0,4423}}{R_{min}^{0,3765} P^{0,1686} w^{0,0868}} \quad (2.26)$$

Analizînd valorile numerice ale exponenților din relație anterioară s-a propus o expresie mai ușor utilizabilă de forma:

$$\frac{R_{opt}}{R_{min}} = x_1 + x_2 \sqrt{\frac{K N_{min}}{R_{min} P w}} \quad (2.27)$$

Aplicarea variantei clasice a metodei celor mai mici pătrate, respectiv rezolvarea sistemului liniar al ecuațiilor  $\partial S_{ap} / \partial x_1 = 0$  și  $\partial S_{ap} / \partial x_2 = 0$  a condus la valorile  $x_1 = 0,9221$  și  $x_2 = 0,3125$ .

Deci o altă relație pentru estimarea refluxului optim va consta în :

$$\frac{R_{opt}}{R_{min}} = 0,9221 + 0,3152 \sqrt{\frac{K N_{min}}{R_{min} \sqrt{Pw}}} \quad (2.28)$$

Pentru ca această relație să dea corelări satisfăcătoare s-a impus  $R_{opt}/R_{min} < 3$ , ea fiind dedusă pentru 118 seturi de date, fiind abandonate cele din experimentul factorial pentru ca  $R_{opt}/R_{min} > 3$ .

Regiunea optimului funcției obiectiv considerate este destul de plată. Acest lucru poate fi observat în fig. 2.7 în care s-a reprezentat dependența lui  $f/f_{min}$  cu  $R/R_{min}$  unde parametrii  $Z_1-Z_3$ ,  $q_0$ ,  $q_f$ ,  $P$ ,  $w$ ,  $R_{min}$  și  $N_{min}$  au valorile de referință din tabelul 2.1. Această constatare conduce la ideea formulării unei relații și mai simple, estimative, pentru valoarea refluxului optim. Ca urmare s-a propus

$$\frac{R_{opt}}{R_{min}} = 1 + x_1 \sqrt{\frac{N_{min}}{R_{min}}} \quad (2.24)$$

Aplicând metoda celor mai mici pătrate pentru 58 seturi de date culese din figurile 2.5 și 2.6 și tabelul 2.2 pentru care  $R_{opt}/R_{min} > 3$  s-a obținut  $x_1 = 0,192$  și deci:

$$\frac{R_{opt}}{R_{min}} = 1 + 0,192 \sqrt{\frac{N_{min}}{R_{min}}} \quad (2.30)$$

Relațiile anterior deduse au fost în continuare testate. În acest sens s-au generat 100 de seturi de valori aleatoare pentru parametrii  $K$ ,  $N_{min}$ ,  $R_{min}$ ,  $P$  și  $w$  (valori cuprinse între cele minime și maxime considerate conform tabelului 2.1). Pentru fiecare set s-au stabilit valorile exacte ale raportului

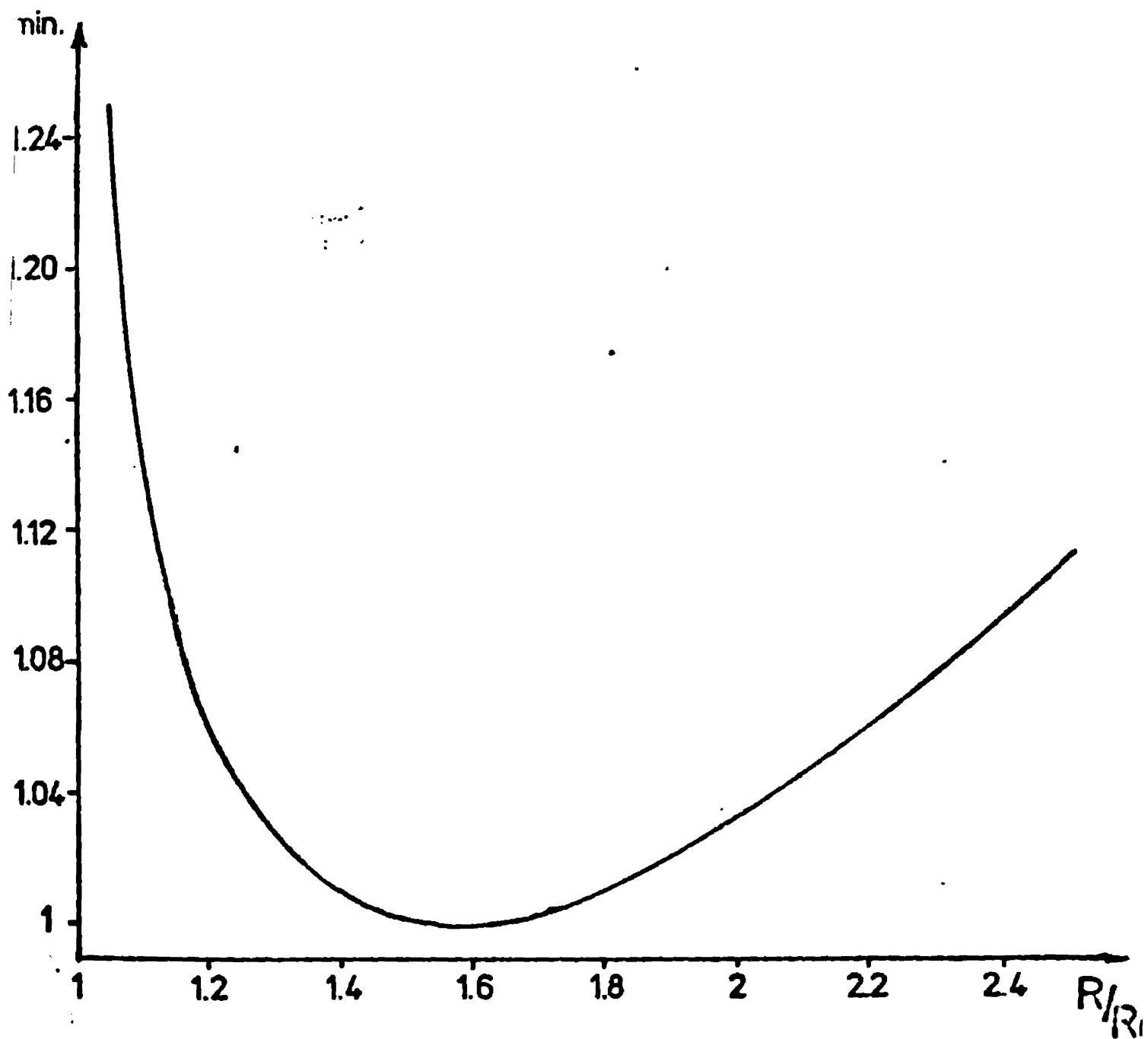


Fig.2.7. Variația raportului  $f/f_{min}$  cu cifra de reflux.

$R_{opt}/R_{min}$ , prin minimizarea funcției obiectiv (2.10), precum și cele estimate de relațiile considerate. Rezultatele testării sînt expuse în figurile 2.8-2.10 și tabelul 2.3. Implicînd o valoare relativă medie de aproximativ 3% relațiile (2.26) și (2.28) se încadrează sub limite de precizie cu care sînt evaluate diferențele categorii de cheltuieli din funcția obiectiv și în general sub limite de precizie a modelului matematic utilizat, respectiv metoda Gilliland. Avînd în vedere simplitatea relației (2.30), precum și faptul arătat anterior că regiunea optimului este destul de plată, eroarea relativă medie de 8,02% corespunzătoare respectivei relații este acceptabilă.

Tabelul 2.3

Relația	Eroare relativă medie	Eroare relativă maximă	Numărul total de teste	Distribuția erorilor			
				$E_{rm} < 5\%$	$E_{rm} = 5-10\%$	$E_{rm} = 10-15\%$	$E_{rm} > 20\%$
(2.26)	2,98%	13,37%	100	83	14	3	0
(2.28)	3,04%	27,17%	100	89	7	2	2
(2.30)	8,02%	26,56%	100	34	31	30	5
=====	=====	=====	=====	=====	=====	=====	=====

In concluzie rezolvarea modelului simplificat pentru calculul optim al unei coloane de rectificare implică următoarele:

1. Pe baza concentrațiilor de alimentare, a distilatului și rezidului și a debitului alimentării care au valori impuse se rezolvă ecuațiile de bilanț de materiale determinîndu-se debitele de distilat și reziduu.

2. Pe baza datelor de echilibru pentru respectivul amestec în conformitate cu presiunea medie impusă și cu compozițiile distilatului și rezidului se determină temperaturile acestora  $T_D$  și  $T_W$  precum și volatilitățile relative ale componentelor cheie la alimentare, în vîrf și în blazul coloanei, respectiv  $\alpha_F$ ;  $\alpha_D$  și  $\alpha_W$ . Volatilitatea medie între vîrf și blaz este media geometrică respectivă  $\bar{\alpha}_{DW} = \sqrt{\alpha_D \alpha_W}$ , iar între vîrf și alimentare, similar

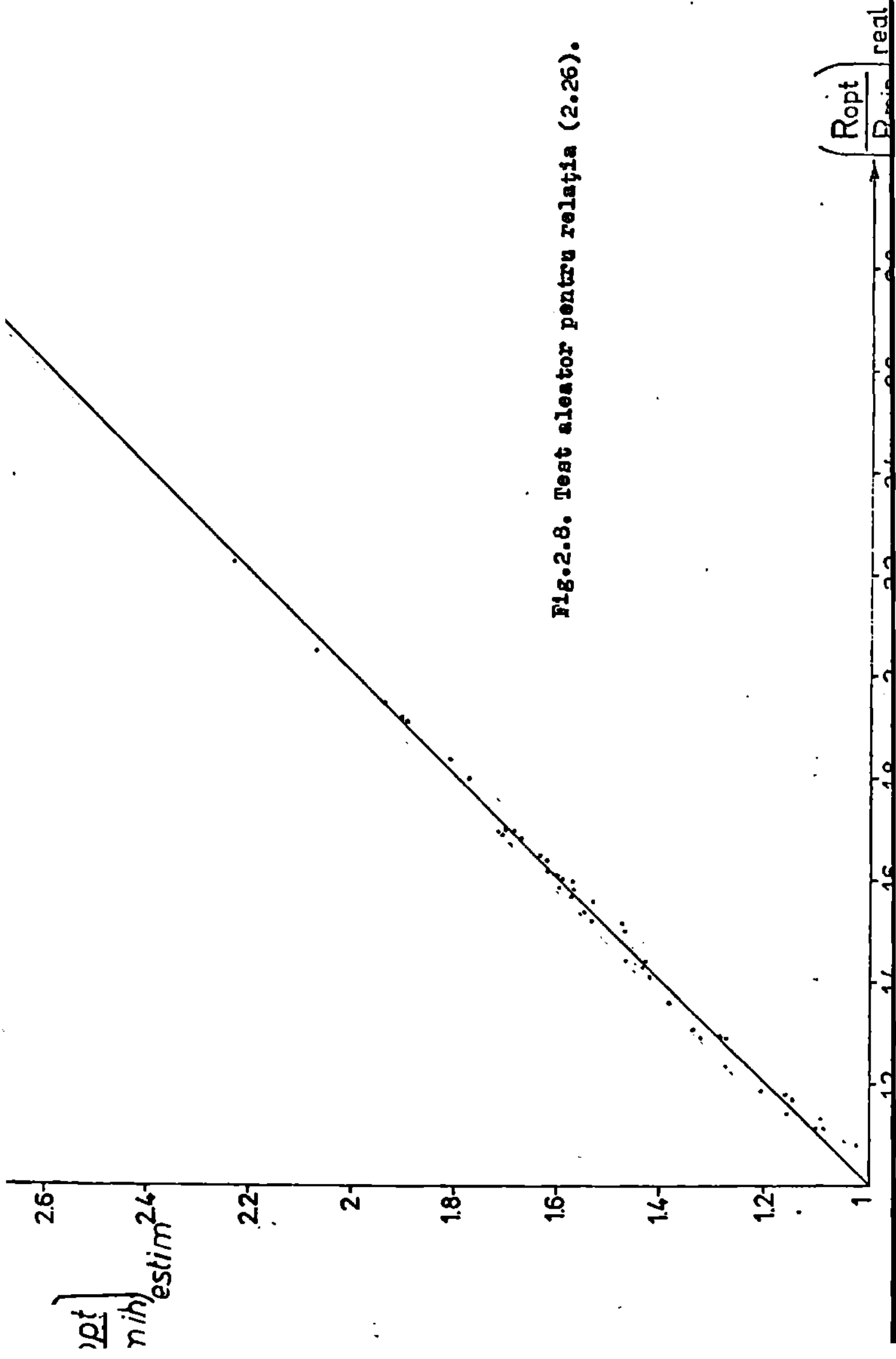


Fig.2.8. Test aleator pentru relația (2.26).

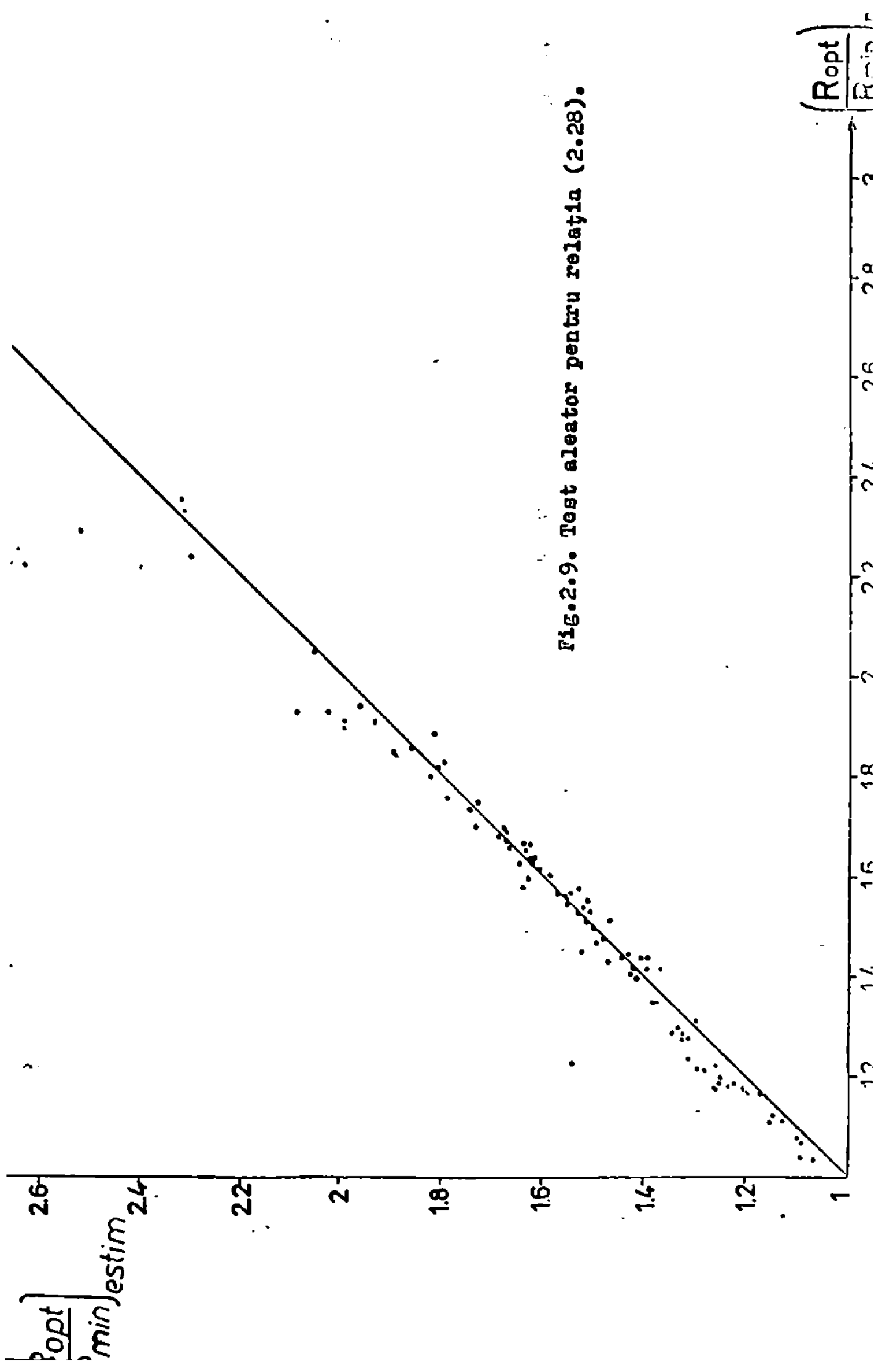


Fig.2.9. Test aleator pentru relatie (2.28).

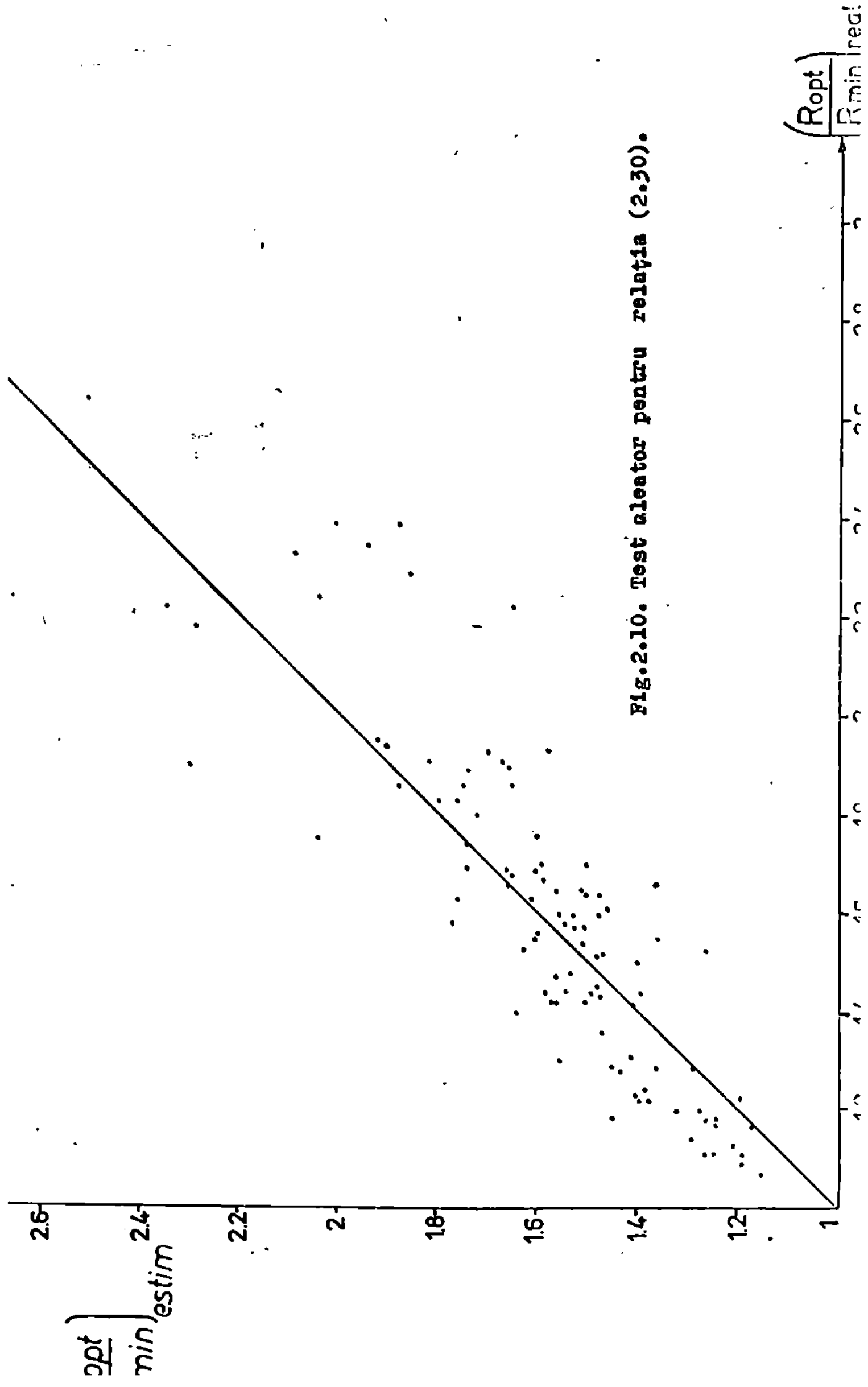


Fig.2.10. Test aleator pentru relația (2.30).

$$\alpha_{DF} = \sqrt{\alpha_D \alpha_F}$$

3. Pe baza relațiilor lui Fenske și Underwood /27/, /28/ se determină numărul minim de talere teoretice  $N_{min}$  și respectiv raportul minim de reflux.

$$N_{min} = \frac{1}{\lg \bar{\alpha}_{DW}} \lg \frac{x_{A,D} x_{B,W}}{x_{B,D} x_{A,W}} - 1 \quad (2.31)$$

$$R_{min} = \frac{1}{\bar{\alpha}_{DF} - 1} \left( \frac{x_{A,D}}{x_{A,F}} - \bar{\alpha}_{DF} \frac{x_{B,D}}{x_{B,F}} \right) \quad (2.32)$$

unde:

$x_{A,D}$ ,  $x_{AF}$ ,  $x_{AF}$  sînt fracțiile molare ale componentului che ușor în distilat, alimentare și reziduu, iar  $x_{BD}$ ,  $x_{BF}$  și  $x_{BW}$  respectivele fracții molare ale componentului cheie greu.

4. Se determină în conformitate cu tipul de talere propus natura amestecului supus fracționării o valoare estimativă a eficienței medii a telerului. În acest sens se pot utiliza une din următoarele relații /28/:

- relația Drickamer și Bradford (dedusă pentru rectificarea produselor petroliere și talere cu clopote)

$$E = 0,17 - 0,616 \lg \eta_F \quad (2.33)$$

în care  $\eta_F = \sum x_{iF} \eta_{iF}$  viscozitatea medie molară a lichidului de alimentare, ( $\eta$  cP) la temperatura  $T_F$ .

- relația O'Connell pentru amestecuri cu volatilități relative ridicate:

$$E = 0,49 (\eta_F \bar{\alpha})^{-0,245} \quad (2.34)$$

- relația Chu:

$$\lg E = 1,67 + 0,3 \lg \left( \frac{L}{V} \right) - 0,25 \lg (\eta_F \bar{\alpha}) + 0,30 \lg h_e \quad (2.35)$$

în care  $L$  și  $V$  sînt debitele molare de reflux și vapori, iar  $h_e$  înălțimea efectivă a lichidului de pe teler.

5. Utilizînd una din relațiile anterior deduse, (2.26), (2.28), (2.30) se estimează valoarea optimă a raportului de reflux.



6. In baza metodei Gilliland respectiv, relațiile (2.12) - (2.15) se determină numărul corespunzător de talere teoretice, iar apoi conform cu rel. (2.11) numărul de talere reale.

7. Se stabilește viteza fictivă a vaporilor în coloană. In lipsă altor date se poate utiliza relația propusă de Heaven (teză de doctorat citată în /12/).

$$W = 0,761 \sqrt{\frac{1}{p_m}} \quad (2.35)$$

unde presiunea medie din coloană  $p_m$  este exprimată în atmosfere.

Se determină apoi diametrul coloanei cu ajutorul relațiilor (2.16) și (2.17).

De remarcat simplitatea de rezolvare a modelului expus ce nu conține nici un fel de calcule iterative, ci doar evaluarea secvențială directă a câtorva mărimi explicite.

#### 2.4. Elaborarea unui model simplificat pentru calculul optim al condensatoarelor

Proiectarea la cheltuieli totale minime a condensatorului unei coloane de rectificare, corespunde determinării dimensiunilor tehnologice optime necesare preluării unui flux de căldură impus. Se va considera că agentul de răcire este utilizat în circuit închis, fiind în consecință prestabilite valorile temperaturilor sale la intrarea și ieșirea din condensator, respectiv  $T_1$  și  $T_2$  și respectiv debitul său. (Această ipoteză nu afectează modul de exprimare al cheltuielilor cu utilitățile din precedentele secțiuni unde costurile unitare cu agentul de răcire  $c_g$  subînțelegeau suma costului propriu-zis al acestuia și a costului unitar energetic corespunzător pomperii sale; evident că unul din acești termeni poate fi nul fără ca respectivă tratare să fie afectată).

Partea variabilă a cheltuielilor totale legate de investiție și exploatarea condensatorului este :

$$C_{T_0} = C_2 + C_4 \quad (2.36)$$

unde  $C_2$  și  $C_4$  au semnificațiile anterioare și anume cheltuielile de amortizare a investiției corespunzătoare condensatorului și respectiv partea variabilă a cheltuielilor legate de circuitul agentului de răcire.

În scopul tratării analitice ce urmează, în exprimarea lui  $C_2$ , respectiv rel. (2.3) se va considera liniarizarea (eventual pe intervale) dependenței cheltuielilor de amortizare în raport cu aria suprafeței de transfer termic, respectiv  $b_2 = 1$ ;  $C_4$  va fi dezvoltat conform semnificației sale. În consecință se obține :

$$C_{T_0} = R_{em} a_2 A_c + 3600 H \frac{\Delta P G_a}{\rho \eta_T} c_E \quad (2.37)$$

unde pe lângă mărimile a căror notație a fost expusă mai apar:

$\Delta P$  - pierderea de presiune a agentului de răcire ( $N/m^2$ )

$\rho$  - densitatea agentului de răcire ( $kg/m^3$ )

$\eta_T$  - randamentul instalației de pompare a agentului de răcire

$c_E$  - costul unitar al energiei electrice (lei/kWh).

Intrucât

$$A_c = \frac{Q}{K_o \Delta T_{mo}} \quad (2.38)$$

iar fluxul de căldură transferată  $Q$  este :

$$Q = G_a c_a (T_e - T_1) \quad (2.39)$$

iar:

$$K_o \approx \frac{1}{\frac{1}{\alpha_1} + \frac{1}{\alpha_2}} \quad (2.40)$$

și substituind  $\Delta T_{mo}$ ,  $Q$  și  $K$  din relațiile (2.20), (2.39)

și (2.40) în relația (2.38) se obține :

$$A_c = G_a c_a \left( \frac{1}{\alpha_1} + \frac{1}{\alpha_2} \right) \ln \left( \frac{T_D - T_1}{T_D - T_e} \right) \quad (2.41)$$

unde  $\alpha_1$  și  $\alpha_2$  sînt cei doi coeficienți parțiali de transfer termic, exprimați ca și  $K_0$  în  $W/m^2 \cdot \text{grad}$ .

În exprimarea coeficientului total de transfer termic  $K_0$  s-a neglijat rezistențele termice ale crustelor și peretelui țevii condensatorului. Considerînd circulația uzual practică a celor două fluide, respectiv agentul în țevi și vaporii de distilat condensînd pe suprafața exterioară a acestora și poziția orizontală a condensatorului se pot utiliza pentru  $\alpha_1$  și  $\alpha_2$  relațiile:

$$\alpha_1 = 0,023 \frac{\lambda}{d_i} Re^{0,8} Pr^{0,4} \quad (2.42)$$

$$\alpha_2 = 0,943 \frac{4 \sqrt{\rho_D^2 g \lambda^2}}{n_v d_e (T_D - T_{P_c}) \eta_D} \quad (2.43)$$

cu următoarea semnificație a notațiilor :

- $\lambda$  - conductivitatea termică a agentului de răcire ( $W/m \cdot \text{grad}$ )
- $d_i$  - diametrul interior al țevilor condensatorului (m)
- $d_e$  - diametrul exterior al țevilor condensatorului (m)
- Re - criteriul Reynolds pentru agentul de răcire
- Pr - criteriul Prandl pentru agentul de răcire
- $\rho_D$  - densitatea lichidului condensat ( $kg/m^3$ )
- $g$  - accelerația gravitației ( $m/s^2$ )
- $\lambda_D$  - conductivitatea termică a lichidului condensat ( $W/m \cdot \text{grad}$ )
- $n_v$  - numărul mediu de țevi în secțiune verticală
- $T_{P_c}$  - temperatura peretelui exterior al țevii condensatorului ( $^{\circ}C$ )
- $\eta_D$  - viscozitatea dinamică a lichidului condensat ( $Ne/m^2$ )

Înlocuind în rel. (2.42) criteriile :

$$Re = \frac{4 G_s}{\pi \eta d_i^n} \quad (2.44)$$

$$Pr = \frac{\eta c_p}{\lambda} \quad (2.45)$$

unde  $\eta$  este viscozitatea dinamică a agentului de răcire (în  $Ne/m^2$ ) iar  $n$  reprezintă numărul total de țevi ale condensatorului, se obține:

$$\alpha_1 = \frac{0,023 \cdot 4^{0,8} \lambda^{0,6} G_s^{0,8} \sigma_s^{0,4}}{\pi^{0,8} d_1^{1,8} n^{0,8} \eta^{0,4}} \quad (2.46)$$

În relația (2.43) pentru numărul mediu de țevi în secțiune verticală se poate utiliza aproximația /29/:

$$n_v \approx 0,5 n^{0,5} \quad (2.47)$$

Din totalul pierderilor de presiune din circuitul lichidului de răcire, în raport cu mărimile de decizie implicate în proiectarea condensatorului sînt evident variabile doar pierderile de presiune din condensator. Acestea se consideră a fi un multiplu al pierderii de presiune în țevi,  $\Delta P_{tv}$

$$\Delta p = B \Delta P_{tv} \quad (2.48)$$

coeficientul supraunitar B introducînd astfel și pierderile de presiune în capace și ștuțuri /29/. Pentru  $\Delta P_{tv}$  se poate scrie conform relației lui Fanning:

$$\Delta P_{tv} = \frac{8 f \ell G^2}{\pi^2 d_1^5 n^2} \quad (2.49)$$

unde  $\ell$  reprezintă lungimea Țevilor condensatorului.

În cazul regimului turbulent, se calculează coeficientul de frecare  $f$  cu ajutorul relației :

$$f = \frac{0,184}{Re^{0,2}} \quad (2.50)$$

Aproximînd  $d_1 \approx d_e$  și substituind rel. (2.43), (2.46) și (2.47) în rel. (2.41) și rel. (2.44), (2.49) și (2.50) în rel. (2.48), iar apoi expresiile obținute pentru  $A_0$  și  $\Delta p$  în funcție obiectiv (2.37), rezultă:

$$C_{T_0} = c_1 d^{1,8} n^{0,8} + c_2 d^{0,25} n^{0,125} + c_3 \frac{\ell}{n^{1,8} d^{4,8}} \quad (2.51)$$

unde grupurile de mărimi constante<sup>x)</sup> sînt grupate în  $c_1, c_2$  și  $c_3$

x) Aproximarea lui  $T_{pe}$  în grupul  $c_2$  nu are implicații majore el intrînd într-o diferență la puterea 0,25.

după cum urmează :

$$c_1 = \frac{35,838 R_{sm} a_2 G_a^{0,2} \sigma_s^{0,6} \eta^{0,4} \ln \left( \frac{T_D - T_1}{T_D - T_e} \right)}{0,504 R_{sm} a_2 G_a \sigma_s \left( \frac{T_D - T_{pe}}{T_D - T_e} \right)^{0,25} \eta_D^{0,25}} \quad (2.52)$$

$$c_2 = \frac{0,504 R_{sm} a_2 G_a \sigma_s \left( \frac{T_D - T_{pe}}{T_D - T_e} \right)^{0,25} \eta_D^{0,25}}{c_1^{0,25} \rho_D^{0,5} \lambda_D^{0,75}} \quad (2.53)$$

$$c_3 = \frac{511,6 H \cdot \sigma_E B G_a^{2,8} \eta^{0,2}}{\eta_T \rho^2} \quad (2.54)$$

Intre variabilele  $d$ ,  $n$  și  $l$  există relația restrictivă

$$\sqrt{n} \ln l = A_0 \quad (2.55)$$

unde  $A_0$  conform substituțiilor efectuate este :

$$A_0 = \frac{c_1 d^{1,8} n^{0,8} + c_2 d^{0,25} n^{0,125}}{R_{sm} \cdot a_2} \quad (2.56)$$

astfel că din relațiile (2.55) și (2.56) se poate explicita variabila  $l$  :

$$l = \frac{c_1}{c_4} \frac{d^{0,8}}{n^{0,2}} + \frac{c_2}{c_4} \frac{1}{d^{0,75} n^{0,875}} \quad (2.57)$$

unde s-a notat :

$$c_4 = \sqrt{n} R_{sm} a_2 \quad (2.58)$$

Substituind pe  $l$  în rel. (2.51) se obține expresia finală a funcției obiectiv ce conține ca singure mărimi variabile pe  $d$  și  $n$  :

$$C_{T_0} = c_1 d^{1,8} n^{0,8} + c_2 d^{0,25} n^{0,125} + \frac{c_1 c_3}{c_4} \frac{1}{d^4 n^2} + \frac{c_2 c_3}{c_4} \frac{1}{d^{5,55} n^{2,675}} \quad (2.59)$$

Diametrul nominal al țevilor poate lua doar câteva valori standardizate /30/ (0,020, 0,025, 0,038 m etc.)

În consecință, se poate rezolva problema stabilirii valorilor optime ale variabilelor  $d$  și  $n$  atribuind succesiv respectivele valori standardizate pentru  $d$  și calculând valoarea optimă corespunzătoare a lui  $n$ , iar final selectând perechea  $d-n$

ce conduce la valoarea minimă a lui  $\sigma_{T_0}$  evaluat în baza rel. (2.59).

În cazul impunerii valorii lui  $d$ , valoarea optimă a lui  $n$  rezultă din condiția de anulare a primei derivate:

$$\frac{\partial \sigma_{T_0}}{\partial n} = 0,8 c_1 \frac{d^{1,8}}{n^{0,2}} + 0,125 c_2 \frac{d^{0,25}}{n^{0,875}} - 2 \frac{c_1 c_3}{c_4} \frac{1}{d^4 n^3} - 2,675 \frac{c_2 c_3}{c_4} \frac{1}{d^{5,55} n^{3,675}} = 0 \quad (2.60)$$

Împărțind relația anterioară cu  $0,8 c_1 d^{1,8}/n^{3,675}$  (operația fiind posibilă întrucît  $c_1$ ,  $d$  și  $n$  nu pot fi nule), rezultă ecuația :

$$n^{3,475} + \frac{0,15625 c_2}{c_1 d^{1,55}} n^{2,8} - \frac{2,5 c_3}{c_4 d^{5,8}} n^{0,675} - \frac{3,3438 c_2 c_3}{c_1 c_4 d^{7,35}} = 0 \quad (2.61)$$

Deși rezolvarea numerică a acestei ecuații prin metodele uzuale (iterații succesive, înjumătățirea intervalului /25/) nu ridică nici un fel de probleme, analiza valorilor uzuale a mărimilor implicate a arătat că termenii 2 și 3 sînt de cîteva ordine mai mici ca termenii 1 și 4. (cel mult de cîteva zeci de ori mai mici). Avînd în vedere și faptul că sînt de semne contrare și necesitatea rotunjirii lui  $n$  la o valoare întregă, respectivii termeni pot fi eliminați fără a implica alterarea soluției. În consecință, după această operație se poate explicita  $n$  rezultînd :

$$n_{opt} = 1,415 \left( \frac{c_2 c_3}{c_1 c_4} \right)^{0,288} \frac{1}{d^{2,115}} \quad (2.62)$$

Această rezolvare nu ține cont însă de restricțiile de natură constructivă ce se impun de obicei lungimii țevilor, respectiv :

$$l_{min} \leq l \leq l_{max} \quad (2.63)$$

Când perechea de valori optime  $d, n$  introdusă în rel. (2.5) conduce la o valoare  $\ell$  ce nu respectă restricția (2.63) rezultă minimul este exterior în raport cu  $\ell/25$ ; în consecință se atribuie lui  $\ell$  valoarea limită violată și se recalculează  $n$  din ecuația (2.57):

In concluzie, rezolvarea modelului simplificat pentru calculul optim estimativ al condensatoarelor decurge astfel:

1. Se calculează grupurile  $c_1-c_4$  formate din mărimi constante.
2. Se atribuie o valoare standardizată diametrului nominal al țevilor.
3. Se calculează numărul optim de țevi conform rel. (2.62).
4. Se calculează lungimea corespunzătoare a țevilor conform rel. (2.57).
5. Se verifică îndeplinirea restricției (2.63). În caz că restricția nu este îndeplinită, se atribuie lungimii țevilor valoarea limită corespunzătoare și se recalculează  $n$  prin rezolvarea iterativă a următoarei ecuații provenite din reordonarea relației (2.57):

$$n = \frac{c_1 d^{0,8}}{c_4 \ell} n^{0,8} + \frac{c_2}{c_4 d^{0,75}} n^{0,125} \quad (2.64)$$

- Metoda iterațiilor simple prezintă o convergență rapidă (sub 10 iterații) pentru această ecuație în valori întregi a lui  $n$ .
6. Se calculează valoarea funcției obiectiv, rel. (2.51) fiind cea mai simplă și se reiau calculele de la pot. 2 până la epuizarea tuturor valorilor standardizate ale diametrului țevilor.
  7. Se selectează ca optimă soluția corespunzătoare valorii minime a funcției obiectiv.

Prezenta rezolvare este net mai simplă decât cea indicată de Avriel și Wilde /29/ care au ajuns în final la rezolvarea unei probleme duale de programare geometrică plecând de la o formulare similară a problemei de față.



Dacă ea, Deși respectiva problemă duală este mai simplă decât cea primară originală (restricțiile fiind liniare și permițând substituții de variabile), rămâne totuși o problemă de determinare a minimumului unei funcții neliniare, pe când procedura anterior expusă implică în situația cea mai defavorabilă posibilă doar câteva rezolvări a unei ecuații neliniare. În plus, valorile obținute pentru diametrul țevilor sînt cele standardizate.

### 2.5. Elaborarea unui model simplificat pentru calculul optim al rețierbătoarelor

Cheltuielile totale legate de investiția și exploatarea rețierbătorului unei coloane de rectificare sînt :

$$C_{T_p} = C_3 + C_5 \quad (2.65)$$

unde  $C_3$  și  $C_5$  au semnificațiile expuse în cap. 2.2 și anume cheltuielile de amortizare a investiției corespunzătoare rețierbătorului și respectiv cheltuielile cu agentul de încălzire utilizat.

Ca și în cazul condensatorului în exprimarea cheltuielilor de amortizare (rel. 2.4) din necesități legate de tratarea analitică corespunzătoare se va considera liniarizarea (eventual pe intervale) dependenței acestora în raport cu aria suprafeței de transfer termic, respectiv  $b_3 = 1$ . În consecință, conform relațiilor (2.4) și (2.6) rezultă :

$$C_{T_p} = R_{sm} a_3 A_p + 3600 H G_A c_A \quad (2.66)$$

Considerînd că încălzirea se face exclusiv pe baza condensării vaporilor saturați și agentului se știe (dacă căldura latentă a agentului  $r_A$  este raportată la 1 kg):

$$G_A = Q / r_A \quad (2.67)$$

iar ținînd cont de rel. (2.21):

$$A_p = \frac{Q}{K_p (T_A - T_W)} \quad (2.68)$$



Substituind ultimele două relații în rel. (2.66) rezultă:

$$C_{T_f} = R_{em} \cdot a_3 \cdot \frac{Q}{K_f (T_A - T_W)} + 3600 H \frac{Q}{r_A} c_A \quad (2.69)$$

Atît căldura latentă cît și costul agentului depind de temperatura sa  $T_A$ . Un abur cu o presiune și respectiv o temperatură mai ridicată este mai scump conform cheltuielilor mai mari implicate pentru producerea sa. În consecință s-au propus pentru respectivele mărimi următoarele ecuații de regresie liniară:

$$c_A = c_{A1} T_A - c_{A2} \quad (2.70)$$

$$r_A = a_V - b_V T_A \quad (2.71)$$

Constantele  $c_{A1}$ ,  $c_{A2}$ ,  $a_V$  și  $b_V$  se calculează prin regresie pe baza cataloagelor de prețuri și respectiv a tabelului cu proprietăți fizice. Astfel pe baza unei valori actuale a unui tip de abur /54/ și a valorilor la diferite alte presiuni indicate în /12/ s-a obținut pentru expresia lui  $c_A$  conform cu rel. (2.70)  $c_{A1} = 1,26 \cdot 10^{-3}$  lei/kg.grad,  $c_{A2} = 4,5 \cdot 10^{-2}$  lei/kg.

Corelînd valorile căldurii latente a aburului la diferite temperaturi indicate în /31/ se obține pentru constantele din rel. (2.71):

$$a_V = 2,727 \cdot 10^6 \text{ J/kg}; b_V = 4153,5 \text{ J/kg.grad}$$

Substituind (2.70) și (2.71) în (2.69) se obține :

$$C_{T_f} = \frac{R_{em} a_3 Q}{K_f (T_A - T_W)} + \frac{3600 H Q (c_{A1} T_A - c_{A2})}{a_V - b_V T_A} \quad (2.72)$$

În această expresie mărimile variabile sînt coeficientul total de transfer termic  $K_f$  și temperatura agentului  $T_A$ .

Geometria aparatului și regimul de temperaturi, respectiv valoarea lui  $T_A$ , pot influența valoarea coeficientului total de transfer termic. Această influență nu este însă foarte mare, fiind vorba de un proces de transfer termic cu schimbare de fază pentru ambele fluide, cărui îi corespund oricum valori ridicate ale coeficienților de transfer termic. În consecință lui  $K_f$  i se poate

atribui o valoare rațional propusă, în funcție de natura fluide-  
lor și caracteristicile constructive ale fierbătorului.

În continuare, pentru determinarea valorii optime a tem-  
peraturii agentului termic se anulează derivata lui  $C_{T_f}$  în rapor  
cu  $T_A$ :

$$\frac{\partial C_{T_f}}{\partial T_A} = - \frac{R_{em} \cdot a_3 Q}{K_f (T_A - T_W)^2} + 3600 H Q \frac{(c_{A1} a_V - c_{A2} b_V)}{(a_V - b_V T_A)^2} = 0 \quad (2.73)$$

Rezultă :

$$T_{A \text{ opt}} = \frac{a_V + C T_W}{b_V + C} \quad (2.74)$$

unde cu  $C$  s-a notat grupul de mărimi constante:

$$C = \sqrt{\frac{3600 H K_f (c_{A1} a_V - c_{A2} b_V)}{R_{em} \cdot a_3}} \quad (2.75)$$

Așa cum se va arăta în cele ce urmează atribuirea unei va-  
lori lui  $K_f$  influențează neesențial valoarea lui  $T_A$  ce urmea-  
ză a fi determinată; ponderea termenului în care intră  $K_f$  în ex-  
presia (2.72) este de asemenea mult mai mică decât a celuilalt  
termen.

Astfel, pentru abur, cu valorile constantelor  $c_{A1}$ ,  $c_{A2}$ ,  
 $a_V$ , și  $b_V$  anterior expuse se obține:

$$T_{A \text{ optim}} = \frac{2,727 \cdot 10^6 + C T_W}{4153,5 + C} \quad (2.76)$$

Propunând valorile uzuale  $H = 8000$  ore/an;  $R_{em} = 0,1$  ;  
 $a_3 = 6000$  lei/m pentru  $K_f = 1000$  W/m<sup>2</sup> grad se obține  $T_{A \text{ opt}} =$   
 $= 6,8 + 0,99 T_W$ , iar pentru  $K_f = 800$  W/m<sup>2</sup> grad se obține  $T_{A \text{ opt}} =$   
 $= 9,8 + 0,99 T_W$ . Deci o variație a lui  $K_f$  cu 20% modifică pe  
 $T_{A \text{ opt}}$  doar cu 3 grade C.

Pentru  $K_f = 1000$  W/m<sup>2</sup> grad și  $T_W = 136^\circ\text{C}$  ponderea primu-  
lui termen în funcția obiectiv (2.72), respectiv ponderea chel-  
tuelilor de amortizare este doar de 6% din  $C_{T_f}$ , astfel că

alegera temperaturii agentului are efecte mult mai importante decât cauze de majorare a coeficientului total de transfer termic al re fierbătorului.

Se ridică posibilitatea aplicării practice a alegerii temperaturii agentului de încălzire: pe o platformă industrială chimică există întotdeauna abur saturat la diferite trepte de presiune, respectiv la diferite temperaturi.

În consecință, în cazul utilizării aburului saturat drept agent de încălzire în re fierbător se poate selecta cel disponibil la temperatura cea mai apropiată de valoarea obținută cu ajutorul rel. (2.74).

## 2.6. Sinteza modulară optimă aplicată la proiectarea sistemelor de separare prin rectificare a amestecurilor multi-componente

Așa cum s-a menționat anterior fracționarea unui amestec în componenții săi folosind ca proprietate de separare diferența de volatilitate este posibil să fi efectuată într-o multitudine de scheme tehnologice. Acestea diferă între ele prin ordinea în care sînt separați componenții finali urmăriți, respectiv prin modul în care sînt fracționate amestecul original și cele intermediare. Astfel chiar și pentru un amestec format din numai trei componente (1, 2, 3), în care aceștia au fost numerotați în ordinea volatilității, există 2 scheme posibile pentru separarea lor individuală: cea corespunzătoare separării într-o primă coloană a componentul 1, urmată apoi de fracționarea amestecului (2, 3) și cea în care inițial se separă componentul 3 urmată de cea a amestecului (1, 2). Numărul de secvențe posibile crește odată cu numărul  $N$  de componente care trebuie separați individual putînd fi calculat cu ajutorul rel. (2.1).

Problema selectării celei mai bune secvențe de separări este de o importanță specială, întrucît între mai multe astfel de sch

chiar dacă fiecare din ele sînt optim proiectate pot exista diferențe însemnate în valoarea cheltuielilor totale implicate. Astfel în separarea prin rectificarea unui amestec de 5 componente (propan, i-butan, n-butan, i-pentan și n-pentan) cheltuielile totale corespunzătoare pentru două scheme distincte optim dimensionate diferă cu 40% /12/.

Rezultă că proiectarea tehnologică optimă în raport cu un anumit criteriu a unei scheme de fracționare a unui amestec multicomponent nu este justificată fără o selecție corespunzătoare a respectivei secvențe de separări.

În evoluția ingineriei chimice respective problema a selecției unei anumite secvențe de separări prin rectificare în scopul fracționării unui amestec multicomponent a fost tratată inițial empiric, iar odată cu abordarea sintezei optime a sistemelor industriale chimice prin utilizarea de metode euristice și algoritmice. Menționăm în continuare o serie de lucrări din literatură ilustrative pentru respectivele metode:

a) Tratarea empirică a constat în esență <sup>în</sup> formularea unei anumite reguli de selecție a schemei de separări, obținute din practica exploatării industriale, din analiza diferitelor categorii de cheltuieli implicate, dintr-o serie de rațiuni evidente etc.

Una din primele reguli de acest tip a fost aceea a alegerii așa-numitei secvențe "directe" prin care se înțelege separarea succesivă ca produse de vîrf a componentelor în ordinea descrescătoare a volatilității lor /32/. Însă, încă din anul 1947 Lockhart /55/ în urma analizei procesului de separare a trei fracțiuni petroliere a arătat că secvența directă nu este cea optimă dacă componentul cel mai puțin volatil este cantitativ predominant în amestec.

Pe baza analizei ponderii diferitelor categorii de obiective Harbert /56/ a formulat principiul conform căruia cea mai bună secvență este cea corespunzătoare consumului minim de căldură, din acesta rezultând următoarele două reguli de selecție:

- cea mai dificilă separare va fi efectuată corespunzător debitului minim de alimentare, deci ultima din secvență.

- secvența cea mai bună este cea care corespunde debitelor molare de distilat și reziduu/<sup>cu</sup> valori cât mai apropiate pentru fiecare separare în parte. Această regulă s-a dovedit ulterior a fi foarte importantă.

#### b) Utilizarea metodelor euristice

Esența acestor metode constă în utilizarea unui set de reguli euristice pentru construirea progresivă a unei cât mai bune secvențe de separări, fără a exista garanția obținerii celei optime. Pentru definirea și investigarea respectivelor reguli de sinteză a sistemului de separări Nishimura și Hiraizumi /9/ au utilizat drept criteriu funcția compusă prin însumarea ponderat a volumului coloanelor de rectificare și a încălzirii termice a reținerilor acestora; în timp ce Heaven (teză de doctorat citată în /32/) a adoptat minimizarea cheltuielilor energetice.

Datorită faptului că respectivele reguli euristice de sinteză pot fi adesea în situații de concurență Powers (teză de doctorat citată în /32/) a dezvoltat o procedură de selecție a acestora folosind ponderarea lor cu anumiți coeficienți; acești se modifică pe parcursul generării și evaluării diferitelor scheme de separare (procedură de învățare bazată pe reguli euristice - vezi detalii în /2/, /5/ etc.). O procedură instructivă similară a fost utilizată de Thompson și King /11/, cu mențiunea specială că în respectivele lucrări sînt considerate și alte operații de separare alături de rectificare.

Așa cum s-a menționat, o lipsă importantă a metodelor euristice este aceea că nu pot garanta optimalitatea soluției oferite, aceasta fiind puternic dependentă<sup>atît</sup> de corectitudinea și consistența pentru fiecare problemă în parte a setului de reguli euristice ale selecției utilizate, cît și de tehnica propriu-zisă de lucru cu respectivele reguli.

#### o) Utilizarea metodelor algoritmice

Caracteristica generală a acestor abordări constă în formularea și rezolvarea respectivelor probleme de sinteză de sistem sau probleme de optimizare. Intrucît și metoda propusă în cadrul lucrării de față este algoritmică, pentru comparație vor fi prezentate mai detaliat cîteva lucrări din literatură din această categorie.

O primă astfel de încercare este lucrarea lui Rod și Marek /57/ care au folosit drept criteriu de optimizare minimizarea sumei debitelor de vapori din coloanele de rectificare, acesta fiind derivat din minimizarea încărcărilor termice ale reținerătorilor. Utilizîndu-se modelele simplificate ale proceselor a fost posibilă exprimarea respectivului criteriu exclusiv în raport cu volatilitatea relativă și compoziția amestecului original, ceea ce a permis soluționarea problemei cu ajutorul metodelor uzuale de optimizare.

Hendry și Hughes /10/ au făcut apel la utilizarea programării dinamice în modul următor: se determină inițial toate grupurile de 2, 3...N-1 componente care pot apărea în diferitele secvențe posibile de fracționare a amestecului original cu N componente, ce urmează să fi separate individual. În continuare se determină condițiile optime pentru separările amestecurilor de doi componente și celelalte totale aferente lor, aceste fracționări corespunzînd cu stadiile finale în respectivele scheme.



Urmează apoi determinarea condițiilor optime și evaluarea tuturor separărilor posibile pentru amestecurile formate din trei componente în câte o fracție conținând doi componente și o altă corespunzând cu cel de-al treilea. Intrucât condițiile optime și cheltuielile respective pentru fracționarea amestecurilor binare a fost stabilită la pasul anterior, se pot forma secvențele optime pentru separările amestecurilor ternare în trei produși diferiți. Procedura se continuă similar pînă la atingerea numărului de componente corespunzător amestecului original.

Fiecare coloană de rectificare a fost optimizată în raport cu următoarele variabile de operare: cifra de reflux, presiunea medie din coloană și încălzirea termică a preîncălzitorului. Compozițiile alimentărilor au fost impuse, considerîndu-se că separările au fost ideale (totale). Alături de rectificare s-a considerat ca procedeu concurent pentru efectuarea fracționărilor distilarea extractivă. Drept urmare ca variabilă de stare la intrarea în stadiile de separare respective a fost impusă presiunea de alimentare, discretizată pe trei valori, unice pentru toate stadiile. În consecință a fost necesară determinarea valorilor optime pentru variabilele de operare anterior menționate pentru fiecare din cele trei valori ale variabilei de stare. Principala critică /13/ adusă metodei propuse de Hendry și Hughes /10/ este volumul mare de calcul necesar pentru determinarea valorilor optime ale variabilelor de operare a stadiilor în cadrul rezolvării subproblemelor generate de aplicarea programării dinamice.

Fapt de optimizarea exhaustivă a tuturor secvențelor posibile, avantajul programării dinamice <sup>constă</sup> în special în reducerea dimensionalității subproblemelor abordate. Numărul acestora este :

$$n_{sp} = (N-1) N (N+1) / 6 \quad (2.77) + 1$$

În cazul frecvent al unor valori mici ale numărului  $N$  de componente și cu considerarea unei singure operații de separare (rectificarea) numărul de subprobleme calculat prin relația anterioară este considerabil sau chiar mai mare decât numărul de secvențe,  $n_{so}$  (rel. 2.1). Astfel pentru  $N = 4$ ,  $n_{sp} = 10$  iar  $n_{so} = 5$ ; pentru  $N = 5$ ,  $n_{sp} = 20$  iar  $n_{so} = 14$ ; pentru  $N = 6$ ,  $n_{sp} = 35$  iar  $n_{so} = 42$ .

O tratare asemănătoare bazată pe programarea dinamică a fost abordată de Ionescu-Bălcești în teza sa de doctorat /52/. S-a luat în considerare și posibilitățile unor grade variabile de separare, astfel că variabilele de optimizare a stadiilor au fost: raportul de separare al componentelor cheie, presiunea de lucru și cifra de reflux.

În cazul existenței preîncălzitoarelor pentru stadiul respectiv de separare s-a introdus și starea termică a alimentării. Ca urmare a gradelor variabile de separare, stările intermediare stadiilor s-au caracterizat cu ajutorul produsului dintre debit și starea termică a respectivului fluid. Modelele utilizate pentru coloanele de separare au fost foarte simple, bazate pe ecuații de bilanț și apelând la liniarizări.

Pe linia reducerii efortului de calcul se încadrează lucrarea lui Westerberg și Stephanopoulos /13/ care au utilizat tehnici matematice mai noi: metoda nivelelor multiple elaborată de Luedon /59/ și strategia "branch and bound". Printr-o tratare corespunzătoare se face posibilă investigarea unui număr restrâns de scheme tehnologice, respectiv cele mai favorabile în raport cu valoarea funcției obiectiv. Procedura este avantajosă mai ales în cazul utilizării mai multor metode de separare, unde crește corespunzător numărul de scheme posibile și unde pot apărea și sisteme nesecventiale ce nu pot fi abordate prin programare dinamică. În lucrare nu se menționează însă modul în care se rezolvă



situațiile în care aplicând metoda nivelelor multiple, datorită neconvexității problemei primale, rezolvarea respectivei probleme duale conduce la soluții nefesabile /25, 59/. Este complet justificată posibilitatea <sup>aparitiei</sup> unor astfel de situații și în cadrul problemelor corespunzătoare obținerii schemei optime de separări.

Sinteza unor scheme neconvenționale, ca cele propuse de Petlyuk, Platonov și Slavinskii /60/ implicând interconectări termice între coloane cu alimentări și evacuări multiple și Rathore, Van Wormer și Powers /12/ în care se cuplează (în situație în care regimul de temperaturi și fluxurile de căldură o permit) necesitățile de răcire de la o coloană cu cele de încălzire de la alta printr-un condensator-refierbător comun nu face parte din obiectul prezentei lucrări.

Tedder și Rudd /61/ au studiat pentru fracționarea amestecurilor ternare influența datelor problemei (compoziția alimentării și dificultatea de separare) asupra alegerii schemei optime de separare. Investigațiile au cuprins atât schemele clasice de fracționare (secvențele directă și indirectă și fracționarea într-o coloană cu evacuări multiple), cât și o serie de scheme neconvenționale conținând evacuări și alimentări multiple și interconectări termice.

Un alt element original al respectivei lucrări îl constituie utilizarea de funcții obiectiv în care cheltuielile de amortizare a investițiilor și cele de operare au fost ponderate diferit. Fiecare din schemele studiate au fost dimensionate opt cu ajutorul metodelor directe uzuale de optimizare.

Referitor la schemele "neconvenționale" de separări prin rectificare propuse în lucrările anterior citate trebuie remarcat faptul că până în prezent nu au fost transpuse în practică,

datorită dificultăților de operare ce pot surveni (instabilitate dinamică) precum și majorării substanțiale a cheltuielilor de investiție, fiind necesare atât circuite și utilaje de recuperare a căldurii, cât și pentru încălzire și răcire cu agent.

#### Metoda sintezei modulare

O parte însemnată din volumul total al calculelor implicate de utilizarea metodelor algoritmice la sinteza schemelor de separare prin rectificare a amestecurilor multicomponente este afectat în scopul dimensionării optime a elementelor constitutive ale sistemului. În general, în sinteza sistemelor cu ajutorul metodelor algoritmice optimizarea repetată a elementelor constitutive pentru fiecare modificare a conexiunilor dintre acestea ridică o dificultate majoră de soluționare.

Plecând de la aceste considerente s-a căutat în cadrul lucrării de față găsirea unei modalități care să reducă la minimum efortul de calcul pentru stabilirea repetată a valorilor optime ale variabilelor de decizie la nivel de element. În acest scop se propune o procedură nouă denumită "sinteză modulară". Caracteristica principală a metodei constă în sinteza sistemului din module optime, printr-un modul înțelegându-se un grup de elemente interconectate absolut necesare structurii respectivului sistem. Astfel în cadrul unei scheme de separare a unui amestec multicomponent un astfel de modul îl formează grupul de utilaje coloană de rectificare - condensator - reîfierbător în care este fracționat un anumit amestec.

În scopul unei dimensionări optime cu efort minim de calcul a respectivului modul s-au elaborat metodele rapide de calcul optim, (cap.2.3-2.5).

Așa cum rezultă din paragrafele precedente acestea sînt explicitări directe ale soluției optime în funcție de datele

proprii fiecărui caz, obținute fie prin corelare statistică (cazul coloanei de rectificare), fie analitic (cazul condensatorului și re fierbătorului). Deci, deosebirea esențială a procedurii, propuse față de celelalte metode algoritmice de sinteză constă în faptul că dimensionarea optimă a elementelor sistemului este făcută cu minim de efort de calcul, prin elaborarea unor modele și metode rapide în acest scop. La nivelul sintezei sistemului se simplifică respectivul volum de calcul, rămânând în continuare a fi optimizate relațiile între modulele componente.

Corespunzător acestei idei sinteza modulară optimă a sistemelor de separare prin rectificare a amestecurilor multicomponente, necesită alături de dimensionarea optimă rapidă a modulelor, procedurile specializate pentru generarea tuturor modulelor constituente, precum și pentru selectarea și conectarea lor în scopul realizării sistemului optim.

#### Generarea modulelor

Se consideră problema generală a separării unui amestec de  $N$  componente ce urmează a fi separați individual. Dacă se notează respectivii componenți cu  $1, 2, \dots, N$  numerotarea fiind făcută în ordinea descrescătoare a volatilității lor, separarea prin rectificare a amestecului original  $(1, 2, 3, \dots, 1, \dots, N-1, N)$  poate fi făcută în  $N-1$  moduri considerând drept componenți cheie perechile  $1/2, 2/3, \dots, N-1/N$ . În acest mod apar drept candidate la separările ulterioare câte 2 amestecuri formate din  $N-1, N-2, \dots, 2$  componenți. De exemplu amestecurile corespunzătoare formate din  $N-1$  componenți sînt  $(1, 2, \dots, N-1)$  și  $(2, 3, \dots, N)$ , cele de  $N-2$  componenți:  $(1, 2, \dots, N-2)$  și  $(3, \dots, N)$  etc. Similar pentru fiecare amestec de  $N-1$  componenți se pot considera  $N-2$  moduri de fracționare rezultînd respectivele perechi simetrice de  $N-2, N-3, \dots, 2$  amestecuri candidate la noi separări.

Procedura poate fi continuată similar până la fracționarea acestecurilor binare. Pe parcursul ei apar însă separări de amestecuri anterior generate prin fracționarea unui amestec cu mai mulți componenți.

Cum fiecare din fracționările posibile pentru oricare din amestecurile de  $N, N-1, \dots, 2$  componenți se execută într-un mod de separare ce poate intra în secvența optimă urmărită, este necesară o procedură care să conducă fără repetări, la generarea acestora. În consecință se propune următoarea procedură de generare completă și neredondantă a modulelor :

1. Fie  $k$  numărul de componenți al amestecului ce urmează a fi fracționat. Se atribuie inițial pentru  $k$  valoarea  $N$ .

2. Fie numărul corespunzător componentului cel mai volatil din fiecare din amestecurile care se obțin prin toate fracționările posibile ale amestecului alcătuit din  $k$  componenți. În conformitate cu modul de variație a lui  $k$  (vezi pasul 4)  $j$  poate lua valorile  $1, 2, \dots, N-(k-1)$ .

3. Se determină pentru fiecare din amestecurile definite prin pașii anteriori toate modalitățile posibile de fracționare. În acest scop se indică componentul cheie ușor care, pentru fiecare din respectivele amestecuri, poate fi la componentul cel mai volatil numerotat cu  $j$  până la penultimul component adică  $j+(k-1)-1$ .

4. Dacă  $k$  este mai mare decât 2 se micșorează  $k$  cu o unitate și se revine la pasul 2.

Numărul de amestecuri distincte de  $N, N-1, \dots, 2$  componenți generate prin această procedură este :

$$n_{sm} = \frac{N(N-1)}{2} \quad (2.78)$$

este în concordanță cu valoarea indicată în /12/ unde se mai adună la valoarea anterioară și cele  $N$  fracții finale formate

dintr-un singur component. Numărul de fracționări posibile pentru aceste amestecuri respectiv numărul de module corespunde cu cel dat de rel. (2.77).

#### Generarea secvențelor

Combinarea modulelor anterior formate în secvențe corespunzătoare fracționării complete a amestecului original poate fi făcută în funcție de caracterul conexiunilor dintre module în următoarele modalități:

a) Mărimile corespunzătoare conexiunilor dintre module nu sînt subiect de optimizare, respectiv compozițiile efluențelor coloanelor fac parte din datele impuse respectivei probleme de sinteză, alături de debitul și compoziția amestecului original. Această situație apreciată a fi mai frecventă este cea care a fost abordată și în cadrul aplicației numerice din prezenta lucrare.

În această situație întrucît mărimile corespunzătoare intrărilor în module sînt date (debite și concentrații) după dimensionarea optimă a acestora (conformă cu conținutul cap. 2.3-2.5) se poate face o generare exhaustivă rapidă tuturor secvențelor posibile și ordonarea lor după valoarea criteriului global de optimizare.

Intrucît o secvență pentru separarea unui amestec în  $N$  componente individuale necesită  $N-1$  module de separare, obținerea tuturor secvențelor constă în principiu în formarea combinațiilor de  $N-1$  module din totalul de  $(N-1)N(N-1) / 6$  și eliminarea celor ilogice.

O secvență este ilogică dacă nu există indentitatea componentelor pe legăturile dintre module. În practică nu este necesară formarea tuturor combinațiilor posibile, prin utilizarea ordonării după volatilitate a componentelor se parcurg prin

permutări toate "traseele" posibile avînd ca punct de plecare amestecul de  $N$  componente iar ca punct final componentii independente. În programarea respectivei proceduri similare cu cea de generare a modulelor se utilizează în acest scop un set de indici și de cicluri adecvat. Fiecărui traseu astfel determinat îi corespunde o secvență de separări al căru cost total este format prin însumarea costurilor modulelor componente optim dimensionate. Deci în raport cu variabilele de proiectare a modulelor fiecare secvență este optimă.

Ordonarea după costul total permite apoi evidențierea schemei optime și confruntarea ei cu alte variante.

Trebuie subliniat faptul că secvența optimă poate fi obținută și pe baza principiilor programării dinamice în modul propus de Hendry și Hughes /10/ ce a fost prezentat anterior (în cazul de față valorile variabilelor de stare corespunzătoare cu conexiunile modulelor fiind constante). În consecință, se determină costurile optime pentru separările binare, se trece apoi la amestecurile ternare etc. În contextul prezentei tratări este eliminat volumul mare de calcul ce se consumă în lucrarea respectivă pentru optimizarea stadiilor în cadrul construcției recursive a secvenței optime.

Hendry și Hughes indică de asemenea și posibilitatea generării și a unor soluții neoptime prin utilizarea unor costuri mai mari decît cele minime în construirea recursivă a secvenței de separări.

Construirea și evaluarea alături de secvența optimă și a altor scheme este justificată prin aceea că pot fi apropiate valoric de cea optimă în raport cu criteriul de selecție utilizat, dar pot prezenta anumite calități ce nu au putut fi incluse în aceste (de exemplu posibilități de operare mai convenabile)



b) Mărimile corespunzătoare conexiunilor dintre module sînt variabile și fac subiect de optimizare. Această situație apare în cazul unei secvențe de separare prin rectificare de obicei cînd nu sînt impuse valorile finale ale concentrațiilor tuturor componentilor separați sau se permite variația acestora pe anumite domenii. În consecință concentrațiile și debitele intermediare modulelor devin variabile. În acest caz se utilizează pentru generarea secvenței optime (și eventual și a altor secvențe conform celor anterior expuse) programarea dinamică în modul indicat de Hendry și Hughes, variabilele aferente conexiunilor formînd respectivul vector al stărilor. Discuția anterioară referitoare la reducerea volumului de calcul prin utilizarea respectivelor metode rapide de calcul optim al stadiilor din secvență este și în acest caz valabilă.

#### Extinderea numărului de variabile

Confruntarea setului variabilelor în raport cu care sînt conduse calculele de optimizare la nivel de element în cadrul lucrărilor anterior citate cu cele considerate în metodele de calcul optim rapid deduse în cap. 2.3-2.5 pun în evidență anumite deosebirii: astfel în prezenta lucrare se merge pe o proiectare optimă mai detaliată decît cea din literatura pentru apratele de transfer termic, în special pentru condensatoare.

Minimizarea cheltuielilor ridicate de funcționarea coloanelor de rectificare este în lucrare făcută efectiv prin intermediul raportului de reflux. În lucrările menționate s-au mai folosit alături de raportul de reflux ca variabile de proiectare optimă și presiunile medii din coloane și stările termice ale alimentării acestora.

Includerea respectivelor mărimi ca variabile (după modificările corespunzătoare ale modelului matematic și func-

ției obiectiv și coloanelor de rectificare) este posibilă într-unul din următoarele două moduri:

- extinderea corespunzătoare a lucrărilor din ep. 2.3 prin corelarea statistică a unui număr suficient de mare de soluții optime pentru noile variabile, obținute prin soluționarea respectivelor probleme de optimizare; deci parcurgerea unei proceduri și obținerea unor expresii analitice pentru respectivele soluții optime similare cu cele pentru determinarea raportului optim de reflux.

- determinarea valorilor optime a respectivelor variabile în cadrul rezolvării problemelor de sinteză cu ajutorul metodelor directe de optimizare. Această procedură este de fapt cea utilizată în literatură, dar în cazul de față condițiile de aplicare sînt mai favorabile prin posibilitățile de calcul rapid al celorlalte variabile.

#### Aplicație numerică

În cele ce urmează s-a considerat problema separării unui amestec de  $N = 4$  componente ce apare în industria cocschimică și petrochimică format din: benzen (1), toluen (2), etilbenzen (3) și o-xilan (4). Notarea componentelor s-a făcut conform procedurii anterioare, în ordinea descrescătoare a volatilităților. Conform rel. (2.78) cele 6 amestecuri posibile a apărea într-o secvență de separări prin rectificare sînt:

- amestecul original de 4 componente : (1, 2, 3, 4)
- două amestecuri de 3 componente: (1, 2, 3) și (2, 3, 4)
- trei amestecuri de 2 componente: (1,2); (2,3) și (3,4).

Cele 10 module (rel.2.77) corespunzătoare fracționărilor posibile pentru amestecurile anterioare sînt:

- trei module corespunzătoare fracționărilor posibile ale amestecului de 4 componente;



$$(1,2,3,4) \longrightarrow (1)/(2,3,4)$$

$$(1,2,3,4) \longrightarrow (1,2)/(3,4)$$

$$(1,2,3,4) \longrightarrow (1,2,3)/(4)$$

- câte două module pentru fracționările posibile ale fiecărui din cele două amestecuri de 3 componente:

$$(1,2,3) \longrightarrow (1)/(2,3)$$

$$(1,2,3) \longrightarrow (1,2)/(3)$$

$$(2,3,4) \longrightarrow (2)/(3,4)$$

$$(2,3,4) \longrightarrow (2,3)/(4)$$

- câte un modul pentru separarea fiecăruia din cele trei amestecuri de 2 componente:

$$(1,2) \longrightarrow (1)/(2)$$

$$(2,3) \longrightarrow (2)/(3)$$

$$(3,4) \longrightarrow (3)/(4)$$

Prin combinările corespunzătoare a câte 3 din cele 10 fracționări anterioare rezultă (rel. 2.1) următoarele 5 scheme posibile (vezi și fig. 2.11)

Schema nr. 1:

$$(1,2,3,4) \longrightarrow (1)/(2,3,4) \longrightarrow (2)/(3,4) \longrightarrow (3)/(4)$$

Schema nr. 2:

$$(1,2,3,4) \longrightarrow (1)/(2,3,4) \longrightarrow (2,3)/(4) \longrightarrow (2)/(3)$$

Schema nr. 3:

$$(1,2,3,4) \longrightarrow (1,2)/3,4 \longrightarrow (1)/(2) + (3)/(4)$$

Schema nr. 4:

$$(1,2,3,4) \longrightarrow (1,2,3)/(4) \longrightarrow (1)/(2,3) \longrightarrow (2)/(3)$$

Schema nr. 5:

$$(1,2,3,4) \longrightarrow (1,2,3)/(4) \longrightarrow (1,2)/(3) \longrightarrow (1)/(2)$$

Programul de calcul folosit în cadrul aplicației este alcătuit din programul principal SI și subrutina MODUL.

Obținerea soluțiilor optime pentru dimensionarea unui

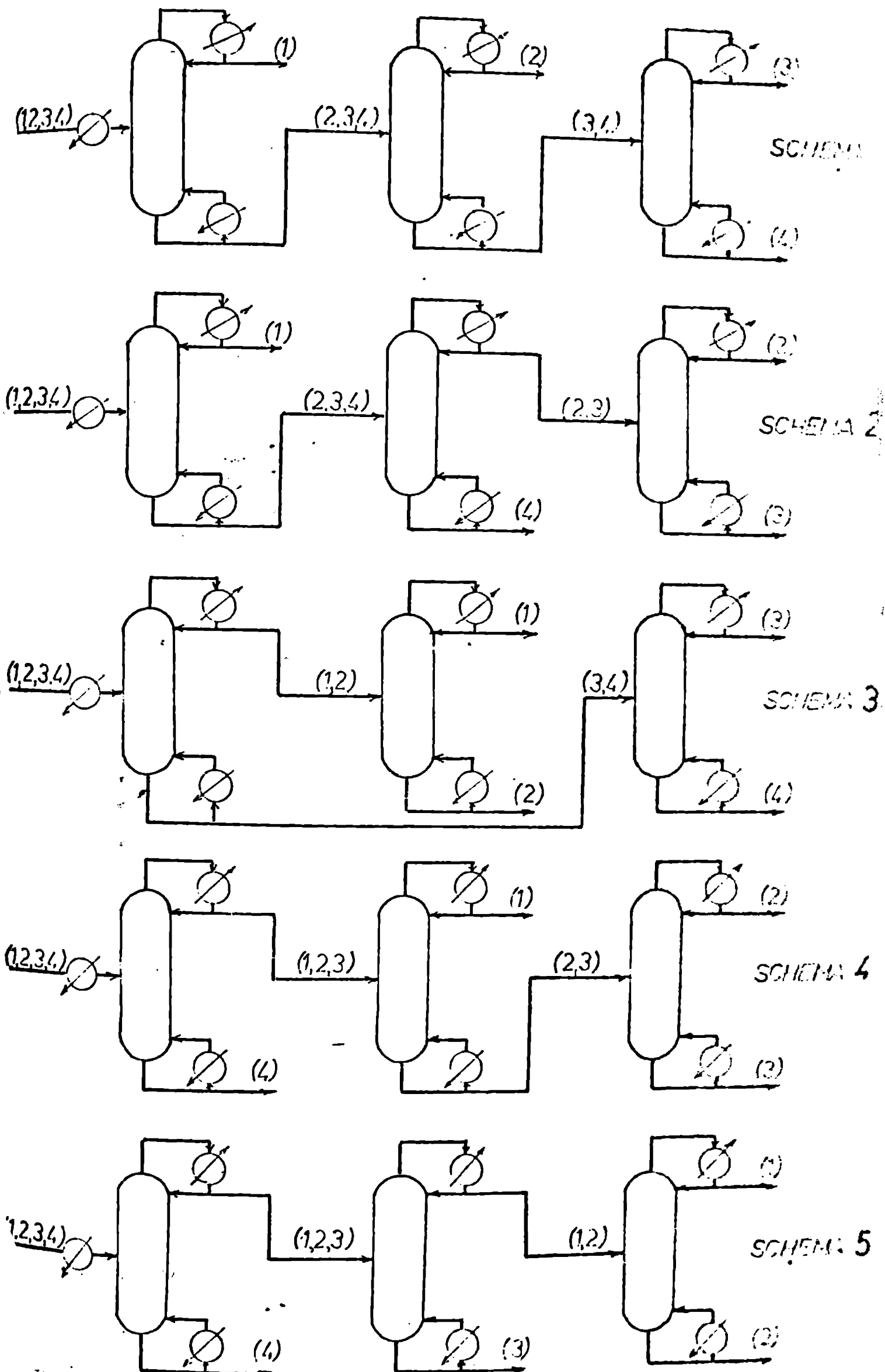


Fig.2.11. Cele 5 scheme posibile pentru separarea a 4 componente.

modul de separare se face în cadrul subrutinei MODUL ce conține metodele rapide expuse în cap. 2.3-2.5. Generarea modulelor este făcută în programul principal în conformitate cu procedura anterior descrisă, în program indicii IC, IV și IS având semnificațiile:

IC - numărul total de componente ai amestecului curent

IV - indicele celui mai volatil component din amestecul curent

IS - indicele componentului cheie ușor.

Prin variația acestora conform relațiilor:

$$2 \leq IC \leq N \quad (2.79)$$

$$1 \leq IV \leq N - K + 1 \quad (2.80)$$

$$IV \leq IS \leq IV + IC - 2 \quad (2.81)$$

și apelarea subrutinei MODUL pentru fiecare combinație IC, IV, IS astfel formată se obțin toate modulele optim dimensionate.

Separările au fost considerate practic totale, concentrațiile maxime impuse componentului cheie ușor în blea și a celui cheie greu în distilat fiind de 0,02. În consecință mărimile corespunzătoare conexiunilor dintre module fiind constante s-au obținut cele 5 scheme posibile de separări prin combinarea directă corespunzătoare a respectivelor module. Această operație împreună cu ordonarea schemelor după valorile crescătoare ale cheltuielilor totale aferente și tipărirea respectivelor rezultate alcătuiesc restul programului principal SI.

Proprietățile fizice implicate în calculul unui modul optim de separare sînt:

- pentru amestecul supus rectificării: presiunile de vapori ale componentelor, viscozitatea fazei de lichide, densitatea fazei lichide, căldura specifică a fazei lichide, căldura de vaporizare, masa moleculară și conductivitatea termică;

- pentru agentul de răcire: viscozitatea, densitatea, căldura specifică și conductivitatea termică.

- pentru agentul de încălzire: căldura de vaporizare.

Pentru amestecul considerat s-au utilizat următoarele constante /31/:

Presiunea de vapori: s-a utilizat ecuația Antoine:

$$P_1 = \exp \left( A_1 - \frac{B_1}{T + C_1} \right) \quad (2.82)$$

Pentru exprimarea presiunii de vapori a componentului  $i$  și a temperaturii  $T$  în grade Celsius valorile constantelor  $A_1$ ,  $B_1$  și  $C_1$  extrase din /31/ sînt prezentate în tab. 2.4.

Tabelul 2.4

$i$	$A_1$	$B_1$	$C_1$
1	15,881966	2777,724	220,237
2	16,010657	3094,543	219,337
3	16,011394	3274,078	212,931
4	16,12475	3402,113	214,024

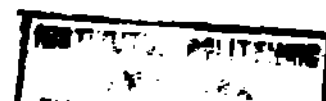
Viscozitatea fazei lichide. Variația cu compoziția s-a dedus conform relației:

$$\lg \eta_{em} = \sum_i x_i \lg \eta_i \quad (2.83)$$

unde  $\eta_{em}$  este viscozitatea amestecului de componente aflate fiecare în concentrația dată de fracția molară  $x_i$ . Variația în raport cu temperatura viscozității componentului  $i$  a fost calculată conform relației:

$$\eta_i = 10^{(a_1 + b_1/T)} \quad (2.84)$$

$\eta_i$  fiind exprimat în  $\text{Ns}/\text{m}^2$  iar  $T$  în grade Kelvin; constantele  $a_1$  și  $b_1$  au valorile indicate în tabelul 2.5 fiind obținute prin corelarea datelor din /31/:



Tabelul 2.5.

i	a <sub>1</sub>	b <sub>1</sub>
1	-5,096225	563,8399
2	-4,905860	498,3618
3	-4,799094	478,5327
4	-4,826073	508,6416

Densitatea fazei lichide s-a calculat cu relația:

$$\rho_{am} = \sum_i \rho_{i1} \cdot x_i \quad (2.85)$$

iar variația densității  $\rho_{i1}$  a componentului 1 (exprimată în kg/m<sup>3</sup>) cu temperatura T (exprimată în grade Celsius):

$$\rho_{i1} = \rho_{0i} (1 - \alpha_1 T) \quad (2.86)$$

constantele  $\rho_{0i}$  și  $\alpha_1$  (tab. 2.6) fiind obținute deosemeni prin corelarea datelor din /31/:

Tabelul 2.6

i	$\rho_{0i}$	$\alpha_1$
1	878,6	0,00106
2	866	0,001109
3	866,9	0,00096
4	889,2	0,00097

Căldura specifică a fazei lichide s-a calculat conform relației

$$c_{s_{am}} = \sum_i c_{s_{i1}} x_i \quad (2.87)$$

iar variația căldurii specifice  $c_{s_{i1}}$  a componentului 1 (exprimată în J/Kmol grad) cu temperatura T (exprimată în grade Celsius):

$$c_{s_{i1}} = \alpha_1 + \beta_1 T \quad (2.88)$$

constantele  $\alpha_1$  și  $\beta_1$  fiind conform cu /31/ cele indicate în tab. 2.7.

Tabelul 2.7

i	$\alpha_i$	$\beta_i$
1	130897,1	326,5
2	153005,0	346,6
3	173104,5	406,9
4	177778,9	406,9

Căldura de vaporizare pentru un amestec de componente avînd fiecare fracția molară în fază lichidă  $x_i$  s-a calculat aditiv:

$$r_{am} = \sum_i r_i x_i \quad (2.89)$$

Variația căldurii de vaporizare  $r_i$  a componentului  $i$  (exprimată în J/Kmol) cu temperatura  $T$  (exprimată în grade Celsius) conform relației:

$$r_i = a_{v_i} + b_{v_i} T \quad (2.90)$$

în care pentru constantele  $a_{v_i}$  și  $b_{v_i}$  s-au obținut prin corelarea datelor experimentale indicate în /31/ valorile expuse în tabelul 2.8.

Tabelul 2.8

i	$a_{v_i}$	$b_{v_i}$
1	35752626	-62036,5
2	38954079	-51219,9
3	52791147	-127510,5
4	50284900	-99871,5

Intrucît pentru etilbenzen și C-xilen nu s-a dispus decît de valorile căldurilor de vaporizare la punctul normal de fierbere, s-au estimat valori la alte temperaturi pe baza metodei Watson /27/ folosind temperaturile critice.

Masa moleculară s-a calculat aditiv, respectiv:

$$M_{am} = \sum_i M_i x_i \quad (2.91)$$

unde masele moleculare ale celor 4 componente sînt

$$M_1 = 78,11; \quad M_2 = 92,13; \quad M_3 = M_4 = 106,16.$$

Pentru conductivitatea termică a fazei lichide s-a utilizat relația aproximativă a lui Weber /27/:

$$\lambda = 0,358 \cdot 10^{-7} \frac{c_s \rho^{4/3}}{M^{1/3}} \quad (2.92)$$

$\lambda$  fiind exprimat în W/m grad,  $c_s$  în J/kg/grad,  $\rho$  în kg/m<sup>3</sup> iar  $M$  în Kg/Kmol.

Ca agent de răcire fost considerată apa între temperaturile  $T_1 = 17^\circ\text{C}$  și  $T_2 = 22^\circ\text{C}$  pentru care valorile constantelor fizice sînt (la  $T_{\text{med}} \approx 20^\circ$ ) /31/:  $\eta = 0,9934 \cdot 10^{-3} \text{ N}_s/\text{m}^2$ ;

$$\rho = 998,2 \text{ kg}/\text{m}^3; \quad c_s = 4182 \text{ J}/\text{kg} \cdot \text{grad} \text{ și } \lambda = 0,597 \text{ W}/\text{m} \cdot \text{grad}.$$

Ca agent de încălzire s-a considerat aburul saturat a cărui ecuație a variației cu temperatura a căldurii de vaporizare a fost prezentată anterior (cap. 2.5)-rel. (2.71)).

Pentru costurile unitare s-au propus valorile:

$$s_1 R_{am} = 1400 \text{ lei}/\text{an} \cdot \text{m}^{0,9} \quad s_2 R_{am} = s_3 R_{am} = 600 \text{ lei}/\text{an} \cdot \text{m} \\ c_a = 0,231 \cdot 10^{-3} \text{ lei}/\text{kg}, \quad c_E = 0,145 \cdot 10^{-6} \text{ lei}/\text{W}_s.$$

Costul aburului a fost exprimat conform celor expuse în cap. 2.5, iar numărul anual de ore de funcționare s-a considerat  $H = 8000$ .

Ca date tehnologice s-a considerat că toate procesele de separare au loc la presiunea atmosferică (deci pentru fiecare separare  $P_m = 760 \text{ torr}$ ), alimentarea coloanelor se face cu lichid la temperatura de fierbere corespunzătoare compoziției, iar eficiența medie a talerelor s-a estimat la  $E = 0,7$ . Pentru proiectarea condensatoarelor s-a considerat că se dispune de țevi cu diametrul standardizat de  $0,025 \text{ m}$ , lungimea lor trebuind să fie cuprinsă între  $1$  și  $4 \text{ m}$ ; randamentul instalației de recuperare s-a considerat să fi  $0,7$ , iar factorului pentru estimarea pierderii de presiune în ștături și capete (rel. 2.40) i s-a

atribuit valoarea  $B = 8$ . Pentru referință s-a propus

$K_f = 1000 \text{ W/m}^2 \text{ grad}$ , iar pentru abur s-a impus condiția  $T_A \geq 110^\circ\text{C}$

Pentru variante de referință s-a propus sinteza optimă a sistemului de separare pentru datele anterior expuse considerind că în amestecul original cei 4 componenți sînt în concentrație egală, debitele molare ale acestora fiind  $Q_{F1} = Q_{F2} = Q_{F3} = Q_{F4} = 0,002 \text{ kmol/s}$ . (Deci debitul molar total al amestecului (1,2,3,4) este de  $0,008 \text{ kmol/s}$ ).

În tabelul 2.9 sînt expuse valorile cheltuielilor totale pentru cele 5 scheme concurente formate la rîndul lor fiecare din module de separare optim proiectate.

Tabelul 2.9

Nr. de ordine	Schema de separări	Cheltuieli totale (lei/an)	Creșterea față de soluția minimă (%)
1	Sc.3: (1,2,3,4) → (1,2)/(3,4) → (1)/(2) + (3)/(4)	$2,8815 \cdot 10^6$	-
2	Sc.1: (1,2,3,4) → (1)/(2,3,4) → (2)/(3,4) → (3)/(4)	$2,8900 \cdot 10^6$	0,3
3	Sc.2: (1,2,3,4) → (1)/(2,3,4) → (2,3)/(4) → (2)/(3)	$3,4267 \cdot 10^6$	18,92
4	Sc.4: (1,2,3,4) → (1,2,3)/(4) → (1)/(2,3) → (2)/(3)	$3,8155 \cdot 10^6$	32,41
5	Sc.5: (1,2,3,4) → (1,2,3)/(4) → (1,2)/(3) → (1)/(2)	$3,9211 \cdot 10^6$	36,08

Se observă importanța problemelor de sinteză a sistemelor de separare: astfel sistemul corespunzător schemei de separări nr. 5 cu toate că este alcătuit din module optim dimensionate (din punctul de vedere al variabilelor respectivei module) implică cheltuieli anuale cu 36,08% mai mari decît cel corespunzător celei mai bune scheme, respectiv schemei nr. 3.

Obținerea exhaustivă a soluțiilor prezintă importanță est



pentru analiză cu caracter teoretic, cât mai ales practic.

Uneori din diferite considerente practice este posibil a se urmări selectarea unei anumite scheme. În respectiva situație se determină dacă aceasta este optimă, iar dacă nu, implicațiile pe care le va aduce această alegere.

Faptul că schema nr. 3 a fost găsită cea mai bună este în concordanță cu regula debitelor echilolare de distilat și reziduu enunțată prima dată de Herbert /56/: faptul că cei patru componente se găsesc în concentrații egale în amestecul original a fost creat în cadrul schemei nr. 3 condițiile corespunzătoare respectivei reguli. De observat și în acest caz valoarea secvenței directe ce corespunde cu o soluție apropiată de cea optimă.

Rezultatele corespunzătoare proiectării optime a modulelor de separare ce alcătuiesc schema optimă sînt reduse în tabelul 2.10.

În legătură cu acestea se pot face următoarele observații: Valorile diametrului coloanei și geometria condensatorului urmează să fi rotunjite la cele mai apropiate valori standardizate, respectiv normalizate. Pentru abur, așa cum s-a menționat se selectează fluxurile disponibile pe platformă la temperaturile cele mai apropiate de cele indicate.

Dintre cele trei module, cel corespunzător separării (3)/(4) intervine cu ponderea cea mai mare la valoarea cheltuielilor totale, respectiv cu 63,76%. Aceasta este urmarea faptului că dintre cele trei separări respective este cea mai dificilă, fapt ilustrabil prin respectivele volatilități relative, numerele minime de talere teoretice și rapoartele minime de reflux.

Așa cum era de așteptat și cum reiese și din literatură (/10/, /12/ etc.) în cheltuielile totale pe modul de separare ponderea cea mai mare o au cheltuielile cu agentul de încălzire:

Tabelul 2.10

Mărimea fizică	Unit. de măsură	Modulul de calcul		
		(1,2)/(3,4)	(1)/(2)	(3)/(4)
<b>Coloana de rectificare</b>				
Temperatura distilatului $T_D$	$^{\circ}C$	91,9	80,1	136,2
Temperatura rezidului $T_W$	$^{\circ}C$	140,0	110,7	144,4
Volatilitatea relativă	-	2,077	2,474	1,245
Numărul minim de talere teoretice $N_{min}$	-	7,8	7,6	34,5
Reportul minim de reflux $R_{min}$	-	1,703	1,263	7,785
Reportul optim de reflux $R_{opt}$	-	1,789	1,308	8,174
Diametrul coloanei D (nerotunjit la valoare STAS)	m	0,772	0,492	1,020
Numărul de talere reale N	-	34	30	128
Cheltuieli de amortizare coloana $C_1$	lei/an	76327	43760	481599
<b>Condensator</b>				
Debitul de agent de răcire $G_a$	kg/s	17,150	7,032	31,085
Coefficientul total de transfer termic, $K_c$	$W/m^2 \text{ } ^{\circ}C$	974,5	1132,2	794,3
Suprafața de transfer termic, $A_c$	$m^2$	5,08	2,14	7,01
Diametrul țevilor, d	m	0,025	0,025	0,025
Numărul optim de țevi $n_{opt}$	-	44	17	86
Lungimea optimă a țevilor, $l_{opt}$	m	1,47	1,61	1,04
Cheltuieli de amortizare condensator, $C_2$	lei/an	3051	1296	4209
Cheltuieli de operare condensator $C_4$	-	387	193	432
Cheltuieli totale condensator $C_{Tc}$	-	3438	1479	4641
<b>Refierător</b>				
Fluxul de căldură transferată Q	W	$3,58 \cdot 10^5$	$1,47 \cdot 10^5$	$6,5 \cdot 10^5$
Debitul de abur $G_A$	kg/s	0,169	0,066	0,309
Temperatura optimă a aburului $T_{Aopt}$	$^{\circ}C$	145,4	116,3	149,7
Suprafața de transfer termic, $A_f$	$m^2$	66,70	25,88	121,94
Cheltuieli de amortizare refierător, $C_3$	lei/an	40021	15527	73165
Cheltuieli de operare refierător, $C_5$	-	672123	191740	1277720
Cheltuieli totale refierător, $C_{Tf}$	-	712144	207260	1350993
Cheltuieli totale modul de separare $C_T$	lei/an	791909	252507	1837133

84,87% pentru modulul (1,2)/(3,4), 75,93% pentru modulul (1)/(2) și 69,55% pentru modulul (3)/(4). În consecință rezultă încă odată redundanțe importante determinării valorii optime a debitului de abur conform determinării raportului optim de reflux și a temperaturii respective a aburului.

Trebuie remarcat faptul că nici una din lucrările înfățișate în literatură nu face referință la temperatura aburului de încălzire subiect de optimizare, deși prin aceasta se pot efectua reduceri suplimentare la cea mai însemnată categorie de cheltuieli din sistem.

Valoarea redusă a cheltuielilor de operare a condensatorului deși frapantă, este perfect explicabilă. Astfel respectivele valori reprezintă doar partea variabilă în raport cu decizia de proiectare, iar Avriel și Wilde /29/ au demonstrat cu ajutorul programării geometrice că ponderea optimă a respectivelor cheltuieli în cheltuielile totale implicate de amortizarea și exploatarea unui condensator este redusă. În consecință soluțiile optime de proiectare a condensatoarelor se orientează către cele corespunzătoare unor valori ridicate ale coeficientului total de transfer termic. Se regăsește astfel regula empirică de proiectare a acestor aparate la limite maxim admisă a pierderilor de presiune.

#### Confruntarea metodei cu un set<sup>le</sup>/reguli euristice

În cele ce urmează s-au confruntat rezultatele obținute prin modificări corespunzătoare ale datelor inițiale cu un set de reguli euristice generate de practica proiectării și exploatarea proceselor de rectificare a amestecurilor multicomponente, o parte din acestea<sup>le</sup> menționate anterior.

S-au luat în considerație următoarele reguli euristice:

/2/, /5/, /9/, /32/, /55/, /56/. Regula A: În caz normal se preferă secvența directă de separare, respectiv separarea succesivă a ce-

lui mai volatil component din amestecul.

Regula B: Separările cele mai dificile (volatilitate redusă, graie înaintate de separare) este indicabil a se face în etapele finale, pentru a avea debite de alimentare mai mici.

Regula C: Este preferabilă acea secvență de separări pentru care la fiecare fracționare debitele molare de distilat și de reziduu au valori cât mai apropiate.

Regula D: Dacă în amestecul inițial un anumit component este cantitativ predominant, se va separa mai întâi acesta.

Regula E: Componentii corozivi și cei toxici trebuie să se separe în primele etape.

Fiecare din aceste reguli are o serie de justificări evidente, rezultate din reducerea unor categorii de oneltuie. Două sau mai multe reguli pot fi de la caz la caz în concordanță sau în opoziție.

Soluția variantei de referință, respectiv schema de separare nr. 3 (tab. 2.9) este în concordanță cu regulile B și C. Așa cum s-a menționat, se observă că regulii euristice A îi corespunde un rezultat apropiat de cel optim. Datele problemei de referință nu permit discuția și a celorlalte două reguli, D și E.

Pentru crearea condițiilor corespunzătoare regulei D, s-au modificat debitele inițiale de alimentare la valorile  $Q_{F1} = Q_{F2} = Q_{F3} = 0,001$ ;  $Q_{F4} = 0,005$  pentru o rulare și la valoarea  $Q_{F1} = Q_{F2} = Q_{F3} = 0,001$ ;  $Q_{F4} = 0,009$ . În consecință fracția de referință fracție molară inițială a componentului 4 s-a modificat de la  $X_{F4} = 0,25$  la  $X_{F4} = 0,623$  și respectiv  $X_{F4} = 0,75$ . Rezultatele comparative sînt prezentate în tab.2.11.

Creșterea compoziției în alimentare a componentului 4 duce la situația în care regulile B și D devin concurente, întrucît separarea acestui component este cea mai dificilă. Când fracția sa molară inițială este de 0,625 cea mai bună schemă de separare

Tabelul 2.11

$x_{F_4} = 0,25$			$x_{F_4} = 0,625$			$x_{F_4} = 0,75$		
Sche- ma	$C_{T_{opt}}$ mil. lei	Crestere $C_{T_{opt}}$ , %	Sche- ma	$C_{T_{opt}}$ mil. lei	Crestere $C_{T_{opt}}$ , %	Sche- ma	$C_{T_{opt}}$ mil. lei	Cres- tere $C_{T_{opt}}$
3	2,8815	-	3	3,2831	-	4	4,5731	-
1	2,8900	0,3	4	3,3520	2,1	5	4,6274	1,10
2	3,4267	18,92	5	3,4063	3,75	3	4,9068	7,30
4	3,8155	32,41	2	3,4326	4,55	2	4,9407	8,00
5	3,9211	36,08	1	3,5125	6,99	1	5,3589	17,18

Schema nr. 3, însă schema nr. 4 trece pe locul doi cu o valoare a cheltuielilor totale numai cu 2,1% mai mare. (față de 32,41% în fața de referință). De remarcat că deși debitul molar inițial este modificat, și doar concentrațiile amestecului original cheltuielile totale optime au crescut foarte mult pentru schema 1 (secvență directă) care devine cea mai nefavorabilă, (implicând separarea componentului predominant în ultimul stadiu) moderat pentru schema 2 și puțin pentru schema 2. Pentru schemele 4 și 5 cheltuielile optime au scăzut simțitor, în respectivele scheme separarea componentului predominant având loc în primul stadiu. Respectivele schimbări se datorează modificărilor soluțiilor de proiectare optimă a modulelor de separare (rezultatele complete respective sunt în anexă).

În cazul studiat când fracția molară în amestecul inițial al componentului 4 este de 0,75 separarea în primul stadiu al acestui component, conformă cu regula D, devine cea mai bună soluție. Cea mai bună soluție, respectiv schema 5, (secvență indirectă), presupune de asemenea separarea componentului predominant în primul stadiu.

Pentru creșterea condițiilor corespunzătoare regulii curis-ului este necesar ca componentul 1 să fie corosiv, respectiv să-

majorat de 4 ori costurile unitare ale amortizării utilităților prin care trece respectivul component. Rezultatele comparative cu varianta de referință sînt expuse în tabelul 2.12.

Tabelul 2.12

Nr. de ordine	Varianta de referință			Varianta componentul 1 presupus coroziv		
	Sche- ma	$C_{T_{opt}}$ , lei	Creștere $C_{T_{opt}}$ , %	Sche- ma	$C_{T_{opt}}$ , lei	Creștere $C_{T_{opt}}$ , %
1	3	$2,8815 \cdot 10^6$	-	1	$3,0957 \cdot 10^6$	-
2	1	$2,8900 \cdot 10^6$	0,3	3	$3,3478 \cdot 10^6$	8,14
3	2	$3,4267 \cdot 10^6$	18,92	2	$3,6324 \cdot 10^6$	17,34
4	4	$3,8155 \cdot 10^6$	32,41	4	$5,6406 \cdot 10^6$	82,21
5	5	$3,9211 \cdot 10^6$	36,08	5	$6,0193 \cdot 10^6$	94,44

Secvența "directă" corespunzînd separării componentului 1 în primul stadiu devine cea mai bună secvență, regula E avînd pentru datele respective întîietate asupra regulii C. Schema 2 cu toate că corespunde și ea unei separări în primul stadiu a componentului presupus coroziv este totuși situată pe a treia poziție întorcînt efectuează separarea mai dificilă a componentului 4 în penultimul stadiu și nu în ultimul conform regulii euristice B. Schemele nr. 4 și 5 sînt deosebit de nefavorabile corespunzînd parcurgerii de componentul presupus coroziv a întregii instalații separarea se efectuîndu-se în stadiul final. Se remarcă încă o dată marea importanță a slagerii unei scheme corecte: astfel schema nr. 5 cu toate că este optim proiectată implică în acest caz cheltuieli anuale aproape duble în raport cu schema nr. 1.

În mod similar s-a presupus coroziv componentul 4 obținîndu-se rezultatele corespunzătoare (în anexă).

Ca o concluzie se impune a sublinia corectitudinea metodei de sinteză propusă în lucrare în confruntarea cu o serie de



reguli eufistice formulate de practica proiectării și explica-  
tării sistemelor de separare prin rectificare a amestecurilor  
multicomponente.

S-a studiat și modul în care raportul dintre costurile  
de amortizare și cele de exploatare modifică structura siste-  
mului sintetizat. În acest scop s-au majorat și diminuat costa-  
rile unitare pentru investiții (de 1,5 și 2 ori, respectiv de  
0,5 și 0,33 ori). În toate cele 4 cazuri ordinea soluțiilor  
optimale pentru cele 5 scheme de separări a rămas aceeași cu cea  
din varianta de bază. S-au modificat (evident) soluțiile de  
proiectare ale modulelor, valorile funcțiilor obiectiv optime  
și ale creșterilor acestora raportate la valoarea corespunză-  
toare celei mai bune scheme. (respectivale rezultate complete  
sînt în anexă). Schimbarea raportului între diferitele catego-  
rii de cheltuieli poate totuși în general să modifice ordona-  
rea după cheltuieli a respectivelor scheme. Faptul că nu s-a  
obținut aceste rezultate se explică prin aceea că în raport  
cu datele problemei domeniul de variație al costurilor unitare  
nu a fost suficient de mare.

Duratele de execuție a programului S 1 au fost nesemnifi-  
cative (cîteva secunde pe minicalculatorul INDEPENDENT loc,  
ce nu prezintă performanțe deosebite de viteză pentru calculele  
în virgulă mobilă). Aceasta este consecința directă a elaboră-  
rii modelelor pentru calculul optim al modulelor din sistem. În  
consecință/<sup>ou</sup>modificările de rigoare programul poate fi utilizat,  
fără riscul unor durate de calcul extrem de mari, dacă numărul  
de componente nu este prea ridicat (pînă la 7-8), și în situa-  
țiile în care presiunile medii și stările termice ale alimentă-  
rilor coloanelor sînt variabile și subiect de optimizare.

### 3. SIMULAREA DINAMICA A SISTEMELOR DE SEPARARE PRIN RECTIFICARE A AMESTECURILOR MULTICOMPONENTE

#### 3.1. Caiul general al problemei

Conducerea automată a proceselor de separare și în ultimă instanță conducerea optimă cu ajutorul calculatorului, necesită cercetarea comportării dinamice a proceselor de separare. În urma acestei cercetări se obțin informații pentru: stabilirea talerelor pe care trebuie fixate traductoarele sistemelor de reglare automată, determinarea inerției canalelor la reglarea procesului după perturbație, precizarea agenților de reglare, stabilirea sistemelor de reglare automată, calculul parametrilor de acordare și reguletoarelor, durata proceselor tranzitorii etc. Având în vedere inerția mare a proceselor de rectificare și purităților mari care se impun în cazul multor separări, rezultă importanța problemelor de analiză și proiectare cât mai riguroasă a conducerii acestor procese.

Paralel cu traterea acestora pe baza unor modele aproximative /22/, /33/ utilizate pentru cerințele practice imediate puse de conducerea automată a proceselor de fracționare s-au elaborat și modele mai riguroase /34/, /35/ bazate pe bilanțuri de materiale și echilibrul lichid-vapori. Aceste modele conțin următoarele ipoteze, sau o mare parte din ele /36/:

1. Pe fiecare taler se realizează o amestecare perfectă, Cu cât diametrul coloanei este mai mare, cu atât situația reală este mai depărtată de regimul de amestecare perfectă.

2. Cantitățile de lichid de pe fiecare taler, din rețierbător, condensator și vasul de reflux sînt constante în timp.

3. Intîrzierile hidraulice, inclusiv cele datorate curgerii lichidului din taler în taler sînt neglijabile. Avînd în vedere că viteza de curgere a lichidului prin deversoare este de



circa 0,1 m/s, iar cea a vaporilor este 0,1-4 m/s (valorile mici se întâlnesc la coloane funcționând la presiuni ridicate) modelele mai evoluate iau în considerare întârzierile datorate curgerii refluxului intern și neglijează pe cele date de curgerea vaporilor.

4. Presiunea în lungul coloanei este constantă. Ipoteza este justificată când variațiile de presiune sînt mici și au un efect neglijabil asupra proprietăților amestecului.

5. Fluxul de vapori și refluxul sînt constante în cele două zone (concentrare și epuizare) ale coloanei. Aceasta presupune aceeași căldură latentă a componentilor, amestecarea componentilor nu dă efecte termice, iar procesul de fracționare se desfășoară adiabatic în cele două zone ale coloanei. Practic această ipoteză conduce la neglijarea ecuației de transport a căldurii.

6. Cantitățile de vapori din zonele dintre talere sînt neglijabile în raport cu cele de lichid de pe talere. Această ipoteză este cu atît mai plauzibilă cu cît presiunea de lucru a coloanei este mai mică.

7. Vaporii se găsesc în echilibru cu lichidul de pe teler, acesta avînd semnificația considerării telerele drept teoretice.

8. Volatilitatea relativă a amestecurilor binare este constantă.

9. Zestrea de lichid a deversorului nu se tratează în mod special.

10. Transferul de căldură interfazic este mult mai intens decît transferul de masă interfazic. Aceasta conduce la ipoteza că vaporii care părăsesc telerul au aceeași temperatură cu lichidul de pe teler.

### 3.2. Un nou model pentru simularea dinamică a proceselor de separare prin rectificare

În cele ce urmează se prezintă elaborarea unui nou model pentru simularea dinamică a proceselor de separare prin rectificare a amestecurilor binare sau multicomponente. Autorul consideră că complexitatea acestui nou model depășește pe cea a modelelor întâlnite în literatura disponibilă, o parte din acestea fiind anterior citate, altele făcând obiectul studiului relativ recent (an 1980) a unor aspecte profunde legate de dinamica acestor procese cum sînt: întârzierile introduse de reîncălzitor /37/ sau operarea cu variație periodică a debitului celor două faze /38/.

Originalitatea modelului constă în elaborarea unei noi modalități de determinare a temperaturii lichidului de pe telerale cocloanei; eliminarea respectivelor calcule iterative prezente în toate celelalte modele din literatură a permis introducerea cineticii transferului de masă, un aspect dessemeni original în cadrul simulării dinamice a rectificării amestecurilor multicomponente.

Din ipotezele anterior menționate se vor păstra doar cele numerotate cu 1, 6, 9 și 10. Dintre acestea cea mai importantă și care poate avea efecte detectabile este prima ipoteză, respectiv impunerea regimului de amestecare perfectă pe teler. Consecințele ipotezelor simplificatoare 6, 9 și 10 sînt mai puțin importante, efectele lor fiind în general sub limita preciziei determinării unor constante fizice din model (de exemplu coeficienții de difuziune) și oricum mult sub limita de precizie generată de ipoteza regimului de amestecare perfectă.

În scopul ușurîței elaborării și rezolvării modelului se consideră că o coloană de rectificare este un sistem format dintr-un set de elemente, fiecare din acesta corespunzînd cu un teler:

In fig. 3.1 se prezintă un astfel de element  $j$  împreună cu fluxurile incidente și emergente.

Se consideră că ansamblul supus rectificării conține  $m$  componente, iar numerotarea telerelor se face de la vârful către baza coloanei, respectiv de la 1 la  $n$ .

Prin considerarea coloanei ca un sistem format din elemente (teler) se obține un grad sporit de generalitate, respectiv posibilitatea de alimentare și evacuare de pe orice teler și de asemenea orice stare termică a alimentării. In modelele expuse în literatură se impune de regulă un enunț teler de alimentare, cu modelul corespunzător (vezi de ex. /39/). In cele ce urmează dacă pe un teler nu există introducere sau evaporare din sau către exteriorul coloanei, respectivele debite  $F_{L_j}$  și  $F_{V_j}$  vor fi nule.

Pentru elaborarea modelului dinamic al elementului (telerului) se scriu, mai întâi, pentru fiecare teler (cele  $m$  ecuații de bilanț de materiale în regim nestaționar, respectiv:

- bilanțul global de materiale :

$$\frac{d N_j}{dt} = L_{j-1} + V_{j+1} - L_j - V_j \pm F_{L_j} \pm F_{V_j} \quad (3.1)$$

- bilanțurile parțiale de materiale pentru  $m-1$  componente:

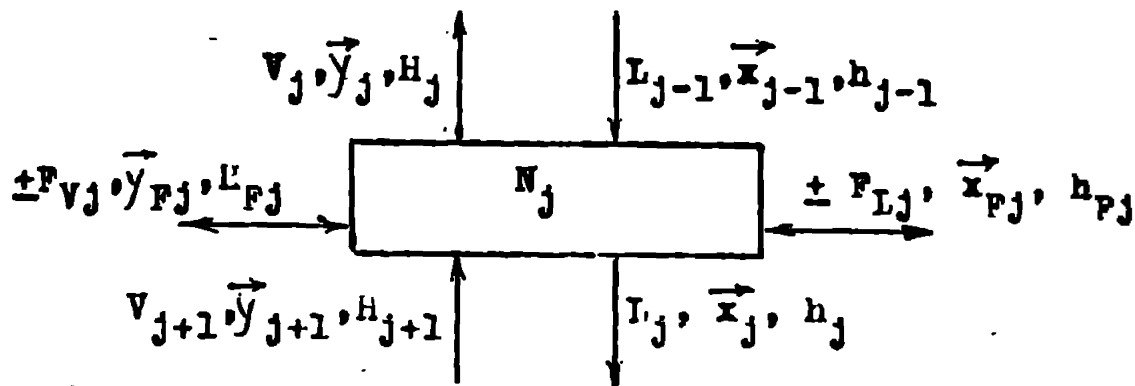
$$\frac{d(\phi N_j x_{ij})}{dt} = L_{j-1} x_{ij-1} + V_{j+1} y_{j+1} - L_j x_{ij} - V_j y_{ij} \pm F_{L_j} x_{Pij} \pm F_{V_j} y_{Pij} \quad (3.2)$$

$$i = 1 \dots m-1$$

$$j = 1 \dots n$$

unde  $t$  reprezintă timpul în secunde, iar  $\phi$  fracția de masă a zestrei de lichid a telerului raportată la zestre sa totală.

După cum se observa în conformitate cu presupunerile regimului amesturării perfecte pe teler, concentrațiile de pe teler sînt egale cu concentrațiile la evacuare. Intrucît zestre



Notatii:

- $L_j, L_{j+1}$  - debitul molar al lichidului ce pleacă pe tălerul inferior, respectiv ce vine de pe cel superior (Kmol/s)
- $V_j, V_{j+1}$  - debitul molar de vapori ce pleacă pe tălerul superior, respectiv ce vine de pe cel inferior (Kmol/s)
- $F_{Lj}, F_{Vj}$  - debitul molar de lichid, respectiv de vapori introdus sau evacuat în exteriorul coloanei de pe tălerul j (Kmol/s)
- $N_j$  - reținerea (zostrea) totală (lichid + vapori) a tălerului j, (Kmol)
- $\vec{x}_{j-1}, \vec{x}_j$  - vectorii concentrațiilor și celor m componente în debitale de lichid ce vin și respectiv ce pleacă de pe tălerul j (fracții molare)
- $\vec{y}_{j+1}, \vec{y}_j$  - vectorii concentrațiilor celor m componente în debitele de vapori ce vin și respectiv ce pleacă de pe tălerul j (fracții molare)
- $\vec{x}_{Fj}, \vec{y}_{Fj}$  - vectorul concentrațiilor celor m componente în debitele de lichid, respectiv de vapori, introduse sau evacuate din coloană în exterior de pe tălerul j (fracții molare)
- $h_{j-1}, h_j$  - entalpia unui kmol de pe lichid ce vine, respectiv ce pleacă de pe tălerul j (J/Kmol)
- $H_{j+1}, H_j$  - entalpia unui kmol de vapori ce vin, respectiv ce pleacă de pe tălerul j (J/Kmol)
- $h_{Fj}, H_{Fj}$  - entalpia unui kmol de lichid, respectiv de vapori introdus sau evacuat din coloană în exterior de pe tălerul j (J/Kmol).

Fig. 3.1. Elementul (tălerul) j cu fluxurile incidente și emergente.

trez de vapori a telerului este de cîteva ordine de mărime mai mică decît zestrea de lichid ce poate considera  $\varphi \approx 1$ . Ținînd cont de aceasta, descompunînd termenul stîng al relației (3.2) rezultă:

$$\frac{d(N_j x_{1j})}{dt} = N_j \frac{d x_{1j}}{dt} + x_{1j} \frac{d N_j}{dt} \quad (3.3)$$

Substituînd rel. (3.3) în rel. (3.2) și explicitînd  $d x_{1j}/dt$  se obține :

$$\frac{d x_{1j}}{dt} = \frac{1}{N_j} \left[ L_{j-1} (x_{1j-1} - x_{1j}) + V_{j+1} (y_{1,j+1} - x_{1j}) - V_j (y_{1j} - x_{1j}) \right. \\ \left. \pm F_{Lj} (x_{F_{1j}} - x_{1j}) \pm F_{Vj} (y_{F_{1j}} - x_{1j}) \right] \quad (3.4)$$

$i = 1, \dots, k-1$   
 $j = 1 \dots n$

În general în calculul în regim staționar sau dinamic al coloanelor de rectificare efortul cel mai mare este depus pentru determinarea temperaturii corespunzătoare compoziției. Aceasta se obține uzual prin rezolvarea iterativă, numerică, a cîte unei ecuații liniare pentru fiecare teler /27/. Respectiva ecuație corespunde îndeplinirii condiției că suma fracțiilor molare,  $y_{1j}^*$  reprezentînd concentrațiile componentilor în fază de vapori în echilibru cu compoziția fazei lichide să fie 1 pentru fiecare teler  $j$ :

$$\sum_{i=1}^m y_{1j}^* = 1 \quad j = 1 \dots n \quad (3.5)$$

unde conform legii lui Dalton:

$$y_{1j}^* = \frac{p_{1j}}{p_j} \quad i = 1 \dots m \quad (3.6)$$

$j = 1 \dots n$

$p_{1j}$  fiind presiunea parțială a componentului  $i$ , iar  $p_j$  presiunea totală (ambele raportate la telerul  $j$ ).

Pentru amestecurile ideale este valabilă legea lui Raoult:

$$P_{1j} = P_{1j}^* x_{1j} \quad \begin{array}{l} i = 1 \dots m \\ j = 1 \dots n \end{array} \quad (3.7)$$

unde  $P_{1j}^*$  este presiunea de vapori a componentului  $i$  de pe telerul  $j$  dependentă de natura componentului  $i$  și de temperatura  $T_j$ . Pentru amestecurile neideale se corectează relația anterioară prin introducerea coeficienților de activitate  $\gamma_{1j}$ :

$$P_{1j} = \gamma_{1j} P_{1j}^* x_{1j} \quad \begin{array}{l} i = 1 \dots m \\ j = 1 \dots n \end{array} \quad (3.8)$$

Substituind rel. (3.6) și (3.8) în rel. (3.5) se obține forma uzuală a relației pentru calculul temperaturii  $T_j$  respectiv:

$$\sum_{i=1}^m \gamma_{1j} P_{1j}^* x_{1j} = p_j \quad j = 1 \dots n \quad (3.9)$$

Cea mai frecventă și disponibilă formă de exprimare a presiunilor de vapori este prin intermediul relației Antoine:

$$P_{1j}^* = \exp \left( A_i - \frac{B_i}{T_j + C_i} \right) \quad \begin{array}{l} i = 1 \dots m \\ j = 1 \dots n \end{array} \quad (3.10)$$

$A_i$ ,  $B_i$  și  $C_i$  fiind așa cum s-a arătat (cap. 2) constante specifice componentului  $i$ . Substituind (3.10) în (3.9) se obține forma finală a ecuațiilor neliniare pentru calculul temperaturilor  $T_j$ :

$$\sum_{i=1}^m \gamma_{1j} x_{1j} \exp \left( A_i - \frac{B_i}{T_j + C_i} \right) = p_j \quad j = 1 \dots n \quad (3.11)$$

cu considerarea  $\gamma_{1j} = 1$  pentru amestecuri ideale.

In cele ce urmează se elimină necesitatea rezolvării acestei ecuații neliniare în cazul modelelor pentru regim dinamic prin următoarea procedură originală:

Notăm cu  $k_{1j}$  constante de echilibru lichid-vapori a componentului  $i$  de pe telerul  $j$  respectiv :

$$k_{1j} = \frac{\gamma_{1j} \exp \left( A_i - \frac{B_i}{T_j + C_i} \right)}{p_j} \quad \begin{array}{l} i = 1 \dots m \\ j = 1 \dots n \end{array} \quad (3.12)$$

ecuația (3.11) poate fi rescrisă după cum urmează :

$$\sum_{i=1}^m k_{ij} x_{ij} = 1 \quad j = 1 \dots m \quad (3.13)$$

Ținând cont de faptul că constantele de echilibru  $k_{ij}$  sînt variabilele în timp prin intermediul temperaturii, derivarea ecuației (3.13) în raport cu timpul conduce la:

$$\sum_{i=1}^m \left( x_{ij} \frac{d k_{ij}}{dt} + k_{ij} \frac{d x_{ij}}{dt} \right) = 0 \quad j = 1 \dots n \quad (3.14)$$

unde derivata  $d k_{ij}/dt$  poate fi scrisă astfel:

$$\frac{d k_{ij}}{dt} = \frac{d k_{ij}}{d T_j} \frac{d T_j}{dt} \quad \begin{matrix} i = 1 \dots m \\ j = 1 \dots n \end{matrix} \quad (3.15)$$

iar:

$$\frac{d k_{ij}}{d T_j} = \frac{B_i}{(T_j + C_i)^2} \frac{V_{ij} \exp \left( A_i - \frac{B_i}{T_j + C_i} \right)}{P_j} = \frac{B_i}{(T_j + C_i)^2} k_{ij}$$

$$\begin{matrix} i = 1 \dots m \\ j = 1 \dots n \end{matrix} \quad (3.16)$$

Substituind rel. (3.15) și (3.16) în rel. (3.14) rezultă:

$$\sum_{i=1}^m \frac{B_i k_{ij} x_{ij}}{(T_j + C_i)^2} \frac{d T_j}{dt} + k_{ij} \frac{d x_{ij}}{dt} = 0 \quad j = 1 \dots n \quad (3.17)$$

oare explicitată în  $d T_j/dt$  dă următorul set de ecuații diferențiale pentru calculul temperaturii de pe fiecare taler  $j$  în raport cu variațiile corespunzătoare de compoziție  $d x_{ij}/dt$ :

$$\frac{d T_j}{dt} = - \frac{\sum_{i=1}^m k_{ij} \frac{d x_{ij}}{dt}}{\sum_{i=1}^m \frac{B_i k_{ij} x_{ij}}{(T_j + C_i)^2}} \quad j = 1 \dots m \quad (3.18)$$

Relația (3.18) este originală, corecta utilizare implicînd integrarea ei cu condițiile inițiale  $T_{j0}$  obținute prin rezolvarea ecuației (3.11). Semnificația fizică a acestei relații este următoarea: dacă la momentul inițial temperaturile pe talere sînt cele de fierbere corespunzătoare compozițiilor și presiunilor



totale respective, variațiile în timp ale temperaturii vor fi în concordanță cu modificările concentrațiilor astfel ca lichidul să se aple în continuare în fierbere. Avantajul deosebit al relației (3.18) constă în faptul că determinarea iterativă a temperaturilor prin rezolvare de ecuații neliniare se face doar o singură dată la timpul inițial.

Pentru stabilirea valorilor inițiale ale temperaturilor de fierbere de pe talere, fiind dată presiunea din blaz, se presupune pierderea de presiune de pe fiecare teler și se rezolvă prin metoda înjumătățirii intervalului /25/, /49/ ecuațiile neliniare (3.11). Se calculează apoi pierderile de presiune de pe talere în modul expus în cele ce urmează și se determină respectivele valori ale temperaturilor printr-o nouă rezolvare a ecuațiilor (3.11). Succesiunea acestor calcule se repetă până când diferențele între valorile de la două iterații succesive ale presiunilor, respectiv temperaturilor de pe talere sînt nesemnificative.

În conformitate cu această <sup>substanțială</sup> reducere/a efortului de calcul de pe talere la determinarea temperaturii lichidului/poate fi sporită complexitatea moleculii în direcții ce vor fi prezentate în cele ce urmează:

Pentru utilizarea practică a relației (3.18) intrucît prin modul de scriere a ecuațiilor de bilanț de materiale se dispun de variațiile compoziției în timp a numai  $m-1$  componente (rel. 3.14) se procedează astfel :

Se scrie suma fracțiilor molare în fază lichidă:

$$\sum_{i=1}^m x_{ij} = 1 \quad j = 1 \dots n \quad (3.19)$$

Se explicitază concentrația componentului  $m$ :

$$x_{mj} = 1 - \sum_{i=1}^{m-1} x_{ij} \quad j = 1 \dots n \quad (3.20)$$

și se derivează în raport cu timpul



$$\frac{d x_{mj}}{dt} = - \sum_{i=1}^{m-1} \frac{d x_{ij}}{dt} \quad j = 1 \dots n \quad (3.21)$$

estfel oă relația (3.18) se poate scrie și în modul următor, mai conform cu derivatele disponibile :

$$\frac{dT_j}{dt} = \frac{- \sum_{i=1}^{m-1} k_{ij} \frac{d x_{ij}}{dt} + \left( \sum_{i=1}^{m-1} \frac{d x_{ij}}{dt} \right) k_{mj}}{\sum_{i=1}^m \frac{B_i k_{ij} x_{ij}}{(T_j + C_i)^2}} \quad (3.22)$$

După darea factorilor comuni, rezultă în final următoarea ecuație de calcul a variației temperaturii în timp:

$$\frac{dT_j}{dt} = \frac{\sum_{i=1}^{m-1} \frac{d x_{ij}}{dt} (k_{mj} - k_{ij})}{\sum_{i=1}^m \frac{B_i k_{ij} \cdot x_{ij}}{(T_j + C_i)^2}} \quad j = 1 \dots n \quad (3.23)$$

Debitul molar de vapori  $V_j$  ce pleacă de pe telerul  $j$  către telerul superior  $j-1$  se calculează din ecuația de bilanț termic a telerului  $j$  în regim nestaționar:

$$\frac{d(N_j h_j)}{dt} = L_{j-1} h_{j-1} + V_{j+1} H_{j+1} - L_j h_j - V_j H_j \pm F_{L_j} h_{F_j} \pm \pm F_{V_j} H_{F_j} - Q_{p_j} \quad (3.24)$$

unde  $Q_{p_j}$  reprezintă fluxul de căldură pierdut în exterior de pe telerul  $j$ . În aplicațiile numerice vor neglija valorile lui  $Q_{p_j}$ .

Se desface termenul stîng:

$$\frac{d(N_j h_j)}{dt} = N_j \frac{d h_j}{dt} + h_j \frac{d N_j}{dt} \quad j = 1 \dots n \quad (3.25)$$

Tinînd cont că entalpia molară a fazei lichide este:

$$h_j = c_{p_j} T_j \quad j = 1 \dots n \quad (3.26)$$

unde  $c_{p_j}$  semnifică căldura molară la presiune constantă și implicit:

$$\frac{d h_j}{dt} = \frac{d h_j}{dT_j} \cdot \frac{dT_j}{dt} = c_{p_j} \frac{dT_j}{dt} \quad j=1 \dots n \quad (3.27)$$

relația de bilanț termic (3.24) devine:

$$N_j \cdot c_{p_j} \frac{dT_j}{dt} + h_j \frac{dN_j}{dt} = L_{j-1} h_{j-1} + V_{j+1} H_{j+1} - L_j h_j - V_j H_j \pm$$

$$\pm F_{Lj} h_{Fj} \pm F_{Vj} H_{Fj} - Q_{p_j} = 0 \quad j = 1 \dots n \quad (3.28)$$

Se înlocuiește  $dN_j/dt$  din rel. (3.1) în expresia anterioară și se ordonează termenii:

$$N_j \cdot c_{p_j} \frac{dT_j}{dt} = L_{j-1} (h_{j-1} - h_j) + V_{j+1} (H_{j+1} - h_j) - V_j (H_j - h_j) \pm F_{Lj} (h_{Fj} - h_j) \pm$$

$$\pm F_{Vj} (H_{Fj} - h_j) - Q_{p_j} = 0 \quad j=1 \dots n \quad (3.29)$$

Se substituie în ecuația de calcul a variației temperaturii (3.23) derivatele concentrațiilor  $dx_{ij}/dt$  din ecuațiile de bilanț de materiale (3.4) și se obține expresia:

$$\frac{dT_j}{dt} = \frac{1}{N_j \sum_{i=1}^{m-1} \frac{B_i k_{1j} x_{ij}}{(T_j + C_i)^2}} \left[ L_{j-1} \sum_{i=1}^{m-1} (x_{ij-1} - x_{ij}) (k_{mj} - k_{ij}) + \right.$$

$$+ V_{j+1} \sum_{i=1}^{m-1} (y_{ij+1} - x_{ij}) (k_{mj} - k_{ij}) - V_j \sum_{i=1}^{m-1} (y_{ij} - x_{ij}) (k_{mj} - k_{ij})$$

$$\left. + F_{Lj} \sum_{i=1}^{m-1} (x_{Fij} - x_{ij}) (k_{mj} - k_{ij}) + F_{Vj} \sum_{i=1}^{m-1} (y_{Fij} - x_{ij}) (k_{mj} - k_{ij}) \right]$$

$$j=1 \dots n \quad (3.30)$$

Se înmulțește relația anterioară cu  $C_{p_j}$  și notînd:

$$Z_j = \frac{C_{p_j}}{\sum_{i=1}^m \frac{B_i k_{1j} x_{ij}}{(T_j + C_i)^2}} \quad j = 1 \dots n \quad (3.31)$$

$$\Delta k_{ij} = k_{mj} - k_{ij} \quad \begin{matrix} i = 1 \dots m-1 \\ j = 1 \dots n \end{matrix} \quad (3.32)$$

rezultă:

$$N_j \cdot C_{p_j} \frac{dT_j}{dt} = \frac{1}{Z_j} \left[ L_{j-1} \sum_{i=1}^{m-1} (x_{ij+1} - x_{ij}) \Delta k_{ij} + V_{j+1} \sum_{i=1}^{m-1} \right.$$

$$(y_{ij+1} - x_{ij}) \Delta k_{ij} - V_j \sum_{i=1}^{m-1} (y_{ij} - x_{ij}) \Delta k_{ij} +$$

$$\left. F_{Lj} \sum_{i=1}^{m-1} (x_{Fij} - x_{ij}) \Delta k_{ij} + F_{Vj} \sum_{i=1}^{m-1} (y_{Fij} - x_{ij}) \Delta k_{ij} \right] \quad j = 1 \dots n \quad (3.33)$$

Eliminînd termenul  $N_j \cdot C_{p_j} \frac{dT_j}{dt}$  între relația anterioară și rel. (3.29) și explicitînd se obține expresia pentru calculul a debitelor  $V_j$ :

$$\begin{aligned}
 V_j = & \frac{1}{H_j - h_j - z_j \sum_{i=1}^{m-1} (y_{ij} - x_{ij}) \Delta k_{ij}} \left\{ L_{j-1} \left[ h_{j-1} - h_j - z_j \sum_{i=1}^{m-1} (x_{ij-1} - x_{ij}) \Delta k_{ij} \right] + \right. \\
 & + V_{j+1} \left[ H_{j+1} - h_j - z_j \sum_{i=1}^{m-1} (y_{ij+1} - x_{ij}) \Delta k_{ij} \right] \pm \\
 & \pm F_{Lj} \left[ h_{Fj} - h_j - z_j \sum_{i=1}^{m-1} (x_{Fij} - x_{ij}) \Delta k_{ij} \right] \pm \\
 & \left. \pm F_{Vj} \left[ h_{Fj} - h_j - z_j \sum_{i=1}^{m-1} (y_{Fij} - x_{ij}) \Delta k_{ij} \right] - Q_p \right\} \quad j=1 \dots n \quad (3.34)
 \end{aligned}$$

Pentru calculul entalpiilor debitelor de vapori se va considera că nu există supraîncălzire a acestora, entalpia lor fiind cea a vaporilor saturați, respectiv:

$$H_j = h_j + r_{Vj} \quad j=1 \dots n \quad (3.35)$$

unde  $r_{Vj}$  reprezintă căldura de vaporizare pentru vaporii de pe talerul  $j$ . Această ipoteză introduce erori complet neglijabile întrucât pe de o parte în relația de bilanț termic (3.24) apar entalpiile  $H_j$  și  $H_{j+1}$  în doi termeni cu semne diferite, iar pe de altă parte datorită valorii reduse a căldurii specifice a gazelor.

Pentru vasul de reflux al coloanei este valabilă următoarea relație de bilanț de materiale:

$$V_1 = L_0 + P \quad (3.36)$$

unde  $V_1$  este debitul de vapori ce pleacă de pe talerul 1 și sînt condensati în condensator,  $L_0$  este debitul de lichid ce se întoarce în coloana ca reflux, iar  $P$  producția de distilat a coloanei. Întrucît raportul de reflux  $R$  este

$$R = \frac{L_0}{P} \quad (3.37)$$

se obține:

$$L_0 = \frac{R}{R+1} V_1 \quad (3.38)$$

Substituind relația anterioară în relația (3.34) pentru primul taler  $j = 1$  se obține expresia necesară pentru calculul debitului  $V_1$ :

$$V_1 = \frac{1}{H_1 - h_1 - Z_1 \sum_{i=1}^{m-1} (y_{i1} - x_{i1}) \Delta k_{ij}} - \frac{R}{R+1} \left[ h_0 - h_1 - Z_1 \sum_{i=1}^{m-1} (x_{i0} - x_{ij}) \Delta k_{ij} \right]$$

$$\cdot \left[ V_2 (H_2 - h_1 - Z_1 \sum_{i=1}^{m-1} (y_{i2} - x_{i1}) \Delta k_{i1}) \pm F_{L1} (h_{F1} - h_1 - Z_1 \sum_{i=1}^{m-1} (x_{F1i} - x_{i1}) \Delta k_{ij}) \pm F_{V1} (H_{F1} - h_1 - Z_1 \sum_{i=1}^{m-1} (y_{F1i} - x_{i1}) \Delta k_{ij}) - Q_p \right] \quad (3.39)$$

unde  $x_{i0}$  și  $h_0$  sînt concentrațiile și entalpia lichidului refluxat. (pentru condensator total se poate considera  $x_{i0} = y_{i1}$  și  $h_0 = h_1$ .)

Pentru calculul debitului de vapori ce pleacă din blaz e-s-a înlocuit termenul corespunzător debitului de vapori  $V_{j+1}$  ce vin din refierbător cu valoarea entalpiei totale  $Q_j$  adusă de acești vapori în refierbător.

Acest mod de tratare permite și simularea coloanelor fără refierbător exterior, respectiv cu încălzire directă a blazului (cu mantă sau serpentină de încălzire, cu rezistență electrică (pe coloane de dimensiuni reduse etc.)  $Q_j$  fiind în aceste cazuri fluxul de încălzire al blazului.

Pentru calculul debitului de lichid ce pleacă de pe telerul j către telerul inferior j+1 s-a folosit relațiile uzuale de curgere peste un deversor ale lui Francis și Courley /27/, /4-/:

$$Q_j = C_{dev} Z^{\alpha_{dev}} \quad (3.40)$$

unde:

- $Q_j$  - debitul volumetric de lichid ce curge prin deversor ( $m^3/s$ ),
- $Z$  - înălțimea lichidului deasupra deversorului măsurată la distanță destul de mare de acesta (m)

$C_{dev}$  și  $\alpha_{dev}$  - constante specifice tipului de deversor.

Pentru deversor plăcă relația lui Francis /27/ indică:

$C_{dev} = 1,84 \cdot l_{dev}$  (unde  $l_{dev}$  este lungimea deversorului exprimat

în m) iar  $\alpha_{dev} = 1,5$ . Pentru deversor circular  $C_{dev} =$

$0,47 \cdot \pi d_{dev}$  (unde  $d_{dev}$  este diametrul deversorului exprimat în

m) iar  $\alpha_{dev} = 1,42$  (relația Courley).

Se exprimă debitul volumetric în funcție de cel molar:

$$Q_{l_j} = \frac{L_j \sum_{i=1}^m x_{ij} M_i}{\sum_{i=1}^m x_{ij} \rho_{li}} \quad j = 1 \dots n \quad (3.41)$$

unde  $M_i$  conform și cu notațiile din capitolul anterior este masa moleculară a componentului  $i$  iar  $\rho_{li}$  densitatea fazei lichide a acestuia.

Înălțimea  $Z$  s-a calculat ca diferență între înălțimea rezei a lichidului pe teler și înălțimea deversorului.

$$Z_j = \frac{V_j}{S_t} - h_{dev} \quad j = 1 \dots n \quad (3.42)$$

unde:

$V_j$  - volumul ocupat de faza lichidă pe telerul  $j$  ( $m^3$ )

$S_t$  - suprafața efectivă a telerului ( $m^2$ )

$h_{dev}$  - înălțimea pragului deversor (m)

Volumul ocupat de faza lichidă pe telerul  $j$  care are o greutate de  $N_j$  Kmoli de amestec lichid-vapori este:

$$V_{lj} = \frac{N_j \sum_{i=1}^m x_{ij} M_i}{(1-\epsilon) \sum_{i=1}^m x_{ij} \rho_{li}} \quad (3.43)$$

unde  $\epsilon$  este fracția medie a volumului de vapori de pe teler.

Înlocuind rel. (3.41), (3.42) și (3.43) în rel. (3.40) și explicitând pe  $L_j$  se obține:

$$L_j = C_{dev} \frac{\sum_{i=1}^m x_{ij} \rho_{li}}{\sum_{i=1}^m x_{ij} M_i} \left[ \frac{N_j \sum_{i=1}^m x_{ij} M_i}{(1-\epsilon) S_t \sum_{i=1}^m x_{ij} \rho_{li}} - h_{dev} \right]^{\alpha_{dev}} \quad j=1 \dots n \quad (3.44)$$

Debitul de lichid ce părăsește blazul coloanei s-a calculat considerând menținerea unui nivel constant în blaz, respectiv a unui volum de lichid constant. În aceste condiții reținerea molară a blazului se calculează direct fără a mai fi necesară integrarea ecuației corespunzătoare (3.1) de bilanț global de materiale, iar debitul de lichid ce părăsește coloana din ecuați

corespunzătoare de bilanțări volumetrică.

Pentru calculul presiunii vaporilor de pe talerul j, se impune valcarea presiunii în blaz și se calculează pierderea de presiune pe fiecare taler. Acest mod de calcul identic cu cel pentru procesul în regim staționar neglijează accelerația ca și lichid de fiind considerat suficient de precis /39/ și în cazul modelelor dinamice.

Discretizarea impusă de integrarea numerică a ecuațiilor diferențiale ale modelului dinamic permite recalcularea periodică a presiunii astfel că deși metoda este imperfectă din punct de vedere matematic (în realitate presiunea fiind variabilă atât în spațiu cât și în timp), erorile implicite sînt nesentiale. În caz că s-ar considera atât variația în timp, cât și în lungul coloanei a presiunii, modelul ar conține ecuații cu derivate parțiale, iar rezolvarea sa ar fi incomparabil mai dificilă. Forma ecuațiilor de calcul a presiunii vaporilor în lungul coloanei depinde de tipul constructiv de talere. În cele ce urmează va fi considerat talerul sită, acesta fiind alături de talerul cu supape cel mai frecvent tip utilizat în prezent. În plus, talerul sită asigură o bună amestecare /41/ fiind în concordanță cu ipoteza cea mai semnificativă a modelului. Pentru pierderea de presiune pe un taler sită s-a folosit următoarea relație uzuală de proiectare /42/:

$$\Delta p = \left[ 1,82 \frac{w_0^2 \rho_g}{2 g \rho_l} + \frac{4 \sigma^2}{\rho_l g (1,3 d_0 + 0,08 d_0)} + 0,65 h_{lev} + h_1 \right] \cdot \rho_l g \frac{760}{1.013 \cdot 10^5} \text{ [torr]} \quad (3.45)$$

unde primul termen reprezintă pierderea de presiune la trecerea gazului prin talerul uscat, cel de al doilea pierderea de presiune datorită tensiunii superficiale, iar ultimii doi termeni pierderea de presiune datorită lichidului care se găsește pe taler.

Significația notațiilor din relație (3.45) este:

- $w_0$  - viteza vaporilor în orificiile telerului (m/s)  
 $\rho_g, \rho_l$  - densitățile celor două faze (kg/m<sup>3</sup>)  
 $\sigma_l$  - tensiunea superficială a lichidului (N/m)  
 $g$  - accelerația gravitației (m/s<sup>2</sup>)  
 $h_1$  - înălțimea lichidului deasupra crestei deversorului (exprimată în m) calculată cu ajutorul relației :

$$h_1 = 2,84 \cdot 10^{-3} K \left( \frac{Q}{3600 l_{dev}} \right)^{0,667} \quad (3.46)$$

coeficientul adimensional  $K$  fiind funcție de raportele  $d_{dev}/D$  (unde  $D$  este diametrul coloanei) și  $Q/l_{dev}^{2,5}$ , având valori cuprinse între 1 și 1,25.

Viteza vaporilor în orificiile telerului se calculează prin raportarea debitului volumetric al vaporilor la suprafața totală a orificiilor telerului:

$$w_0 = \frac{Q_v}{S_t \varphi} = \frac{V_j \sum_{i=1}^m y_{ij} M_i}{\rho_g S_t \varphi} \quad (3.47)$$

unde  $\varphi$  este fracția secțiunii libere a orificiilor telerului, iar care pentru orificii așezate cu centrul în vârful unui triunghi echilibrat cu latură  $t$ , este:

$$\varphi = \frac{\pi d_0^2}{2 \sqrt{3} t^2} \quad (3.48)$$

Înlocuim rel. (3.41), (3.46) și (3.47) în rel. (3.45) și efectuând calculele rezultă pentru telerul  $j$ :

$$\Delta p_j = \frac{0,00683}{\rho_g} \left( \frac{V_j \sum_{i=1}^m y_{ij} M_i}{\varphi S_t} \right)^2 + \frac{0,02175 \sigma_l}{d_0} + 0,0478 \rho_l h_1 + 0,059 \rho_l^{0,33} \left( \frac{L_j \sum_{i=1}^m x_{ij} M_i}{l_{dev}} \right)^{0,667} \quad (3.49)$$

$j = 1 \dots n$

$$\text{iar } p_j = p_{j+1} - \Delta p_j \quad j = 1 \dots n \quad (3.50)$$

Calculul concentrațiilor componentilor în faza de vapori  
 s-a efectuat pe baza exprimării eficienței telerului după



Murphree /43/, una din cele mai vechi metode de exprimare a eficienței talerului. Cu toate acestea este apreciată de Holland în lucrarea sa de referință în domeniul separării amestecurilor multicomponente /44/ ca fiind cea mai sigură și mai generală în comparație cu o serie de metode mai noi. Eficiența talerului după Murphree, este de asemenea concordantă cu ipoteza amestecării perfecte, întrucât consideră curgerea vaporilor în regim cu deplasare totală între talere și cu amestecare perfectă pe talere.

Eficiența talerului după Murphree exprimă raportorul dintre îmbogățirea vaporilor pe talerul real și îmbogățirea vaporilor pe talerul ideal:

$$E_{ij} = \frac{y_{ij} - y_{i,j+1}}{y_{ij}^* - y_{i,j+1}} \quad \begin{matrix} i = 1 \dots m \\ j = 1 \dots n \end{matrix} \quad (3.51)$$

Eficiența locală după Murphree, calculată pe baza coeficientului total de transfer de masă este exprimată astfel:

$$E_{ij} = 1 - \exp. (-K_{G_{ij}} S_t/V_j) \quad \begin{matrix} i = 1 \dots m \\ j = 1 \dots n \end{matrix} \quad (3.52)$$

unde  $K_{G_{ij}}$  este coeficientul total de transfer de masă raportat la faza gazoasă pentru componentul  $i$  pe talerul  $j$ .

Din cuplarea ecuațiilor (3.51) și (3.52) se obține expresia necesară calculului concentrațiilor vaporilor ce părăsesc talerul  $j$  în funcție de concentrația vaporilor ce vin de pe talerul inferior  $j+1$ :

$$y_{ij} = y_{i,j+1} + \left[ 1 - \exp. (-K_{G_{ij}} S_t/V_j) \right] (y_{ij}^* - y_{i,j+1}) \quad \begin{matrix} i = 1 \dots m \\ j = 1 \dots n \end{matrix} \quad (3.53)$$

Este puțin probabil ca să se îndeplinească condițiile  $\sum_{i=1}^m y_{ij} = 1$  pentru  $j = 1 \dots m$  având în vedere aproximațiile ce se vor face la calculul coeficienților totali de transfer de masă  $K_{G_{ij}}$ . În consecință valorile obținute pentru  $y_{ij}$  se corectează prin înmulțirea lor cu  $1 / \sum_{i=1}^m y_{ij}$ . Am considera: acest mod de lucru mai echilibrat.



tabil pentru valcarea concentrației fiecărui component în parte decât metoda uzuală în care se calculează fracțiile molare a  $m$ -componentei prin rel. (3.53), iar pentru cel de al  $m$ -lea component se determină prin diferența  $y_{mj} = 1 - \sum_{i=1}^{m-1} y_{ij}$ . Deși în varianta adoptată volumul de calcul este mai mare (se calculează toți coeficienții  $K_{G_{ij}}$ ) se evită situațiile în care pentru  $\sum_{i=1}^{m-1} y_{ij} > 1$  s-ar obține valoarea absurdă  $y_{mj} < 0$ .

Coefficientul total de transfer de masă se calculează prin relația clasică pe baza coeficienților parțiali pentru filmul de gaz  $k_g$  și respectiv lichid  $k_l$ .

$$K_G = \frac{1}{\frac{k}{k_g} + \frac{m}{k_l}} \quad (3.54)$$

în ființa pantei curbei de echilibru. În conformitate cu tratarea anterioară a echilibrului lichid-vapori  $m = k_{ij}$  unde  $k_{ij}$  este exprimat conform rel. (3.12). În consecință

$$K_{G_{ij}} = \frac{1}{\frac{m}{k_{G_{ij}}} + \frac{k_{ij}}{k_{l_{ij}}}} \quad \begin{matrix} i = 1 \dots m \\ j = 1 \dots n \end{matrix} \quad (3.55)$$

Pentru evaluarea coeficienților parțiali de transfer de masă se utilizează relațiile criteriale uzuale. În cadrul lucrării de față s-au folosit următoarele expresii [42]:

- pentru filmul de vapori relația criterială Planovski-Kestekin:

$$Sh = 2 \quad Re^{0,9} \quad Sc^{0,25} \quad (3.56)$$

- pentru filmul de lichid :

$$Sh = 0,23 \quad So^{0,5} \quad Re^{1,10} \quad Ga^{0,24} \quad \rho^{-1} \quad (3.57)$$

unde criteriile ce intervin au expresiile uzuale :

$$Re = \frac{W l \rho}{\eta} ; \quad Sh = \frac{k l}{D} ; \quad So = \frac{\eta}{\rho D} ; \quad Ga = \frac{g l^3 \rho^2}{\eta^2} \quad (3.58)$$

proprietățile fizice fiind raportate la faza corespunzătoare.

În relația (3.56) lungimea caracteristică  $l$  se calculează astfel :

$$l = \left( \frac{2 \sigma_l}{\rho_l g} \right)^{0,5} \quad (3.59)$$

În relația (3.57) lungimea caracteristică  $l$  corespunde cu înălțimea statică a lichidului pe teler, calculată conform expresiei:

$$h_{stj} = 0,65 h_{dev} + 0,8 \left( \frac{l_j \sum_{i=1}^m x_{1j} K_i}{\rho_{lj} l_{dev}} \right)^{0,667} \quad (3.60)$$

Viteza fictivă din criteriul Reynolds este raportată în rel. (3.56) la secțiunea liberă a coloanei, în timp ce în rel. (3.57) la suprafața efectivă a telerului. Acestea se obțin din pris secțiunii libere a coloanei prin scăderea suprafețelor de versoarelor. Suprafața segmentului de cerc ocupat de un versor s-a obținut prin următoarea expresie:

$$S_j = \frac{D^2}{8} \left( \frac{\pi \alpha}{180} - \sin \alpha \right) \quad (3.61)$$

$\alpha$  fiind unghiul de centru calculat cu relația:

$$\alpha = 2 \arcsin \left( \frac{l_{dev}}{D} \right) \quad (3.62)$$

În relația (3.57) simplul geometric  $\Gamma$  este raportul între înălțimea statică a lichidului pe teler și înălțimea statică a amestecului vapor-lichid pe teler fiind în consecință egal cu fracția volumului fazei lichide:

$$\Gamma = 1 - \varepsilon \quad (3.63)$$

Coefficienții parțiali de transfer de masă calculați în baza relațiilor de mai sus sînt raportați la suprafața efectivă a telerului și sînt exprimați în  $m/h$ . Drept urmare sînt transformați în  $Kmol/m^2 h \Delta y$  (coeficientul raportat la filmul de gaz) și în  $Kmol/m^2 h \Delta x$  (coeficientul raportat la filmul de lichid) conform relațiilor:

$$\left[ \frac{Kmol}{m^2 h \Delta y} \right] = \frac{1}{22,41} \frac{273}{T_j + 273} \cdot \left[ \frac{m}{h} \right] \quad (3.64)$$

$$\left[ \frac{Kmol}{m^2 h \Delta x} \right] = \frac{\rho_{lj}}{\sum_{i=1}^m x_{1j} K_j} \cdot \left[ \frac{m}{h} \right] \quad (3.65)$$

În exprimarea eficienței locale, rel. (3.41), debitul de vapori va fi în consecință exprimat în kmol/h.

Pentru calculul coeficienților de difuziune în filmul de gaz format din mai mulți componenți s-a utilizat relație propusă de Wilke /45/, /46/:

$$D_{g_i} = \frac{1 - y_i}{\sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^m \frac{y_k}{D_{g_{ik}}}} \quad (3.66)$$

în care coeficientul de difuzie în filmul de gaz al componentului  $i$  în componentul  $k$ ,  $D_{g_{ik}}$ , s-a determinat în baza relației lui Maxwell modificată de Gilliland /42/:

$$D_{g_{ik}} = \frac{3,268 \cdot 10^{-4} (273 + T)^{3/2}}{p (\bar{v}_i^{1/3} + \bar{v}_k^{1/3})^2} \sqrt{\frac{1}{k_1} + \frac{1}{k_2}} \quad (3.67)$$

coeficientul de difuzie fiind exprimat în  $m^2/s$  pentru expresia presiunii  $p$  în torr, temperaturii  $T$  în grade Celsius și a volumelor molare  $\bar{v}_i$ ,  $\bar{v}_k$  la punctul normal de fierbere în  $cm^3/mol$ .

Pentru calculul coeficienților de difuziune în filmul de lichid al unui amestec multicomponent relațiile sînt mai puțin exacte decît pentru filmul de gaz.

Conform lui Bird, Hirschfelder și Curtiss /47/ s-a calculat difuzivitatea binară efectivă a componentului  $i$  pe baza relației:

$$D_{l_i} = \frac{1 - x_i}{\sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^m \frac{x_k}{D_{l_{ik}}}} \quad (3.68)$$

în care coeficientul de difuzie în filmul de lichid al componentului  $i$  în componentul  $k$ ,  $D_{l_{ik}}$ , s-a determinat în baza relației lui Wilke și Chang /48/:

$$D_{l_{ik}} = 7,4 \cdot 10^{-15} \frac{(\alpha_k \cdot k_k)^{1/2} (T + 273)}{0,6} \quad (3.69)$$

Pentru exprimarea coeficientului de difuzie în  $m^2/s$  în expresia anterioară viscozitatea în fază lichidă a componentului  $k$  este exprimată în  $Ne/m^2$ , temperatura  $T$  în grade Celsius, iar volumul molar  $V_1$  al componentului  $i$  la punctul normal de fierbere este în  $cm^3/mol$ . Parametrul de asociație al lichidului  $\alpha_k$  depinde de natura lichidului  $k$ .

În încheierea expunerii modelului elaborat se prezintă relațiile de corelare a proprietăților fizice implicate.

Pentru faza lichidă apar în cadrul ecuațiilor modelului următoarele proprietăți fizice ale căror expresii s-au prezentat în cap. 2.6: viscozitatea (rel. 2.83 și 2.84), densitatea (rel. 2.85 și 2.86), căldura specifică (rel. 2.87 și 2.88), căldura de vaporizare (rel. 2.89 și 2.90) și masa moleculară (2.91).

Suplimentar apare tensiunea superficială, care în lipsa unor informații din literatură, s-a calculat pentru un amestec în mod aditiv:

$$\sigma_{lj} = \sum_{i=1}^m x_{ij} \sigma_{ij} \quad \begin{matrix} i = 1 \dots n \\ j = 1 \dots m \end{matrix} \quad (3.70)$$

dependența cu temperatura de pe talerul  $j$  a tensiunii superficiale a componentului  $i$ ,  $\sigma_{ij}$  fiind exprimată liniar:

$$\sigma_{ij} = \sigma_{o_i} (1 - \alpha_i \cdot T_j) \quad (3.71)$$

Pentru faza gazoasă este necesar calculul viscozității, masei moleculare și densității:

Viscozitatea fazei gazoase la talerul  $j$  s-a calculat conform relației:

$$\eta_{gj} = \frac{\sum_{i=1}^m y_{ij} M_i}{\sum_{i=1}^m \frac{y_{ij} M_i}{\eta_i}} \quad j = 1 \dots m \quad (3.72)$$

unde variația cu temperatura exprimată în grade Kelvin a viscozității componentului  $i$  în fază gazoasă este:

$$\eta_1 = \eta_{01} \left( \frac{273 + C_1}{T + C_1} \right) \left( \frac{T}{273} \right)^{1,5} \quad (3.73)$$

Pentru amestecul de 4 componente indicat anterior, utilizat și în aplicațiile ce urmează, valorile constantelor numerice din rel. (3.71) și (3.73) extrase din /31/ și conform cu unitățile și sînt expuse în tabelul 3.1.

Tabelul 3.1

i	$\sigma_{01}$	$\alpha_1$	$\eta_{01}$	$C_1$
1	0,03108	0,00394	$0,62 \cdot 10^{-5}$	281
2	0,02990	0,00351	$0,66 \cdot 10^{-5}$	269
3	0,03180	0,00424	$0,66 \cdot 10^{-5}$	269 *
4	$0,03180^*$	$0,00424^*$	$0,66 \cdot 10^{-5}^*$	269 *

\*) valori asimilate din lipsă de date.

Mase moleculare a fazei gazoase s-a calculat astfel:

$$M_{g_j} = \sum_{i=1}^m y_{ij} M_i \quad (3.74)$$

iar densitatea acestuia în baza legii gazelor ideale:

$$\rho_{g_j} = \frac{M_{g_j} p_j}{R T_j} \quad (3.75)$$

R-fiind constanta gazelor ideale. Pentru exprimarea lui  $\rho_{g_j}$  în  $\text{kg/m}^3$ ,  $p_j$  este în  $\text{N/m}^2$ ,  $T_j$  în grade Kelvin, iar  $R = 8315 \text{ J/Kmol } ^\circ\text{K}$ .

Dacă se lucrează la presiuni ridicate în rel. (3.75) trebuie să introduși coeficienții de fugacitate.

În ecuațiile anterioare mai intervin următoarele constante fizice:

— coeficienții de activitate  $\gamma_{ij}$ ; amestecul considerat este ideal astfel că aceștia au valoarea 1.

— parametri de asociație ai lichidului  $\chi_k$ ; amestecul considerat fiind format din lichide neasociate aceștia au valoarea

— volumele molare/punctul normal de fierbere: s-au utilizat valorile stabilite pe baza formulelor structurale ale celor 4 compuși în conformitate cu modul de calcul indicat în /31/ și /42/. Respectivăle valori exprimate în  $\text{cm}^3/\text{mol}$ :  $V_1 = 96$ ;  $V_2 = 110,2$ ;  $V_3 = V_4 = 140,4$  sînt în concordanță satisfăcătoare cu cele calculate pe baza densității vaporilor la punctul normal de fierbere ( $V_1 = 97,15$ ;  $V_2 = 121,27$ ;  $V_3 = 140,88$ ;  $V_4 = 130,04$ ). Experimental au fost determinate doar valorile  $V_1 = 95,84$  și  $V_2 = 118,57$ .

### 3.3. Testarea modelului elaborat

#### 3.3.1. Algoritmul utilizat și programele de calcul elaborate.

Rezumînd cele expuse în paragraful anterior se poate spune că modelul de simulare în regim dinamic a proceselor de rectificare a amestecurilor multicomponente conține în esență pentru fiecare teler <sup>\*)</sup>  $m + 1$  ecuații diferențiale de ordinul I: în ecuații de bilanț de materie (3.1) și (3.4) și o ecuație pentru calculul variației temperaturii lichidului (3.23). Din aceste ecuații se obțin prin integrare numerică valorile reinerii molare a telerului  $N_j$ , concentrațiilor în faza lichidă a  $m-1$  componente  $x_{1j}$  și temperaturii  $T_j$ . În sistemul de ecuații diferențiale mai intervin o serie de mărimi calculabile din expresii algebrice ce au fost explicitate, respectiv:

- debitul molar de vapori ce părăsesc telerul  $V_j$  - rel. (3.34)
- debitul molar al lichidului ce părăsește telerul  $L_j$  - rel. (3.44)
- presiunea vaporilor de pe telerul  $j$  (rel. 3.49) și (3.50)
- compoziția vaporilor de pe telerul  $j$  (rel. (3.53)).

---

\*) Inclusive blazul cu particularitățile corespunzătoare expuse în paragraful precedent, conținînd doar  $m$  ecuații diferențiale.

La rândul lor în expresiile anterior menționate intervin o serie de alte mărimi și de proprietăți fizice al căror calcul a fost prezentat.

Ca urmare a fost necesară alegerea unei metode de integrare numerică, precum și elaborarea unei scheme de orionare a calculilor din expresiile algebrice.

În general integrarea ecuațiilor diferențiale din cadrul modelelor dinamice a proceselor de rectificare expuse în literatură (/36/, /39/ etc.) a fost posibilă cu metode simple (tip Euler) cu pași de integrare destul de mari. În cazul de față prezența termenilor exponențiali în ecuația temperaturii (3.23) a determinat ca aceste metode să nu prezinte stabilitate. În consecință s-a apelat la metoda Runge-Kutta /49/ utilizându-se în acest scop subrutina RKGS din biblioteca de subrutine științifice a sistemului de operare RSX 11 B.

Programul general de calcul (vezi anexa) este scris în limbajul FORTRAN și conține următoarele module:

1 - programul principal: conține inițializări de mărimi variabile, constante, introduceri de date, apelarea subrutinei INIT pentru calculul condițiilor inițiale, conform stării fizice presupuse la momentul inițial și apelarea subrutinei de integrare numerică RKGS.

2 - subrutina INIT: se apelează când nu se introduce direct ca date condițiile inițiale pentru variabilele integrate. Scopul principal constă în determinarea temperaturilor de fierbere pe fiecare taler corespunzătoare cu compoziția inițială dată pentru faza lichidă.

3 - subrutina DEBL - calculează debitul de lichid precum și densitățile, entalpiile și masele molare medii corespunzătoare



4 - subrutina BLAZ - calculează debitul, compoziția și entalpia vaporilor ce se ridică din olazul coloanei.

5 - subrutina TALER - calculează pentru fiecare teler cu începere de la baza coloanei debitul de vaporii, presiunea, compoziția și entalpia vaporilor. Conține în acest scop relațiile pentru calculul proprietăților fizice necesare și calculul eficienței telorului în modul anterior expus. În caz că indicele ITT=1 telorul este considerat teoretic, iar eficiența este în consecință egală cu unitatea.

6 - subrutina RKGS - conține așa cum s-a menționat metodele de integrare numerică Runge-Kutta de ordinul 4 cu pas de integrare ajustabil și control al erorii de integrare. Apelează subrutinele FCT și OUTF.

7 - subrutina FCT - conține rezolvarea drept al ecuațiilor diferențiale integrate (31), (34) și (3.23). Pentru calculul mărimilor implicate apelează subrutinele DEBL, BLAZ și TALER.

8 - subrutina OUTF - verifică îndeplinirea condițiilor finale pentru integrarea numerică și tipărește rezultate.

Mărimile constante sînt inițializate în codulul specializat BLOCK DATA.

În conformitate cu diferitele scopuri menționate în cadrul aplicațiilor s-au realizat 9 versiuni de programe de simulare conținute în anexă.

În general fiecare din versiunile respective conțin modulele prezentate anterior cu funcțiunile menționate. Există însă și o serie de modificări de instrucțiuni stît în programul principal, cît și în subrutine în conformitate cu scopul respectivei aplicații.

O primă aplicație a fost realizată în scopul testării primare a modelului și programelor corespunzătoare elaborate: s-a urmărit simularea perioadei de pornire a unui proces de recirculare a unui amestec de trei componente pînă la intrarea în



Cei trei componenți și fracțiile lor molare în amestecul supus separării sînt: benzol: 0,6; toluen 0,3; etilbenzen 0,1.

Pentru separare s-a propus o coloană cu talere și a cărei parametrii constructivi sînt prezentați în tabelul 3.2.

Tabelul 3.2

Par a m e t r u	unit. de măsură	Valoare
- Numărul de talere	-	10
--Talerul de alimentare	-	4
- Diametrul coloanei	m	0,8
- Lungimea pragului deversor	m	0,48
- Înălțimea pragului deversor	m	0,025
- Diametrul orificiilor laterale	m	0,002
- Secțiunea totală a orificiilor	m <sup>2</sup>	0,04
- Frația volumului de vapor pe taler	-	0,5
- Volumul de lichid din blaz	m <sup>3</sup>	0,146
- Fluxul de căldură primit în blaz	W	417000
- Presiunea din blaz	torr	760
- Debitul amestecului de alimentare	Kmol/s	0,0053
- Raportul de reflux	-	3

S-a considerat tipul de talere sită cu deversor, iar condensatorul total. S-au neglijat pierderile de căldură prin pereții coloanei către exterior. Alimentarea este făcută cu lichid la temperatura normală de fierbere corespunzătoare compoziției (90,33°C).

Drept condiții inițiale s-au considerat teleretele umplute cu lichid de alimentare pînă la înălțimea pragului deversor, temperaturile pe talere fiind conform condițiilor lor anterioare cele de fierbere la respectivele presiuni. Pasul maxim de integrare a fost impus la 3 secunde pe durata ciclului linut de

evoluție a procesului, iar apoi 15 secunde. <sup>a)</sup>

Exemplul considerat a impus integrarea unui sistem de 43 ecuații diferențiale.

S-a considerat, că atingerea regimului staționar corespunde momentului în care derivatele în raport cu timpul pentru variabile integrate au valori sub  $10^{-6}$ . Ulterior s-a observat că această condiție este prea severă întrucât și la valori ale derivatelor de  $10^{-5}$  procesul este practic staționar.

S-au considerat situațiile în care coloana ar funcționa cu talere teoretice (eficiența fiind egală cu unitatea), precum și când talerele sînt reale, corespunzătoare cu valorile calculate ale eficienței în modul anterior prezentat. Pentru reducerea duratei totale de calcul s-a încercat pentru variante cu talere reale un calcul periodic al eficienței în modul următor: se calculează pentru fiecare increment de timp valorile eficiențelor, pînă cînd media derivatelor în raport cu timpul a variabilelor integrate devine mai mică decît o anumită valoare limită (s-a utilizat pentru aceasta valoarea de  $10^{-2}$ ), iar apoi eficiențele sînt recalculate doar la anumite intervale de timp (2 min.); astfel se recalculează respectivele eficiențe în orice moment în care media derivatelor este mai mare decît valoarea limită impusă.

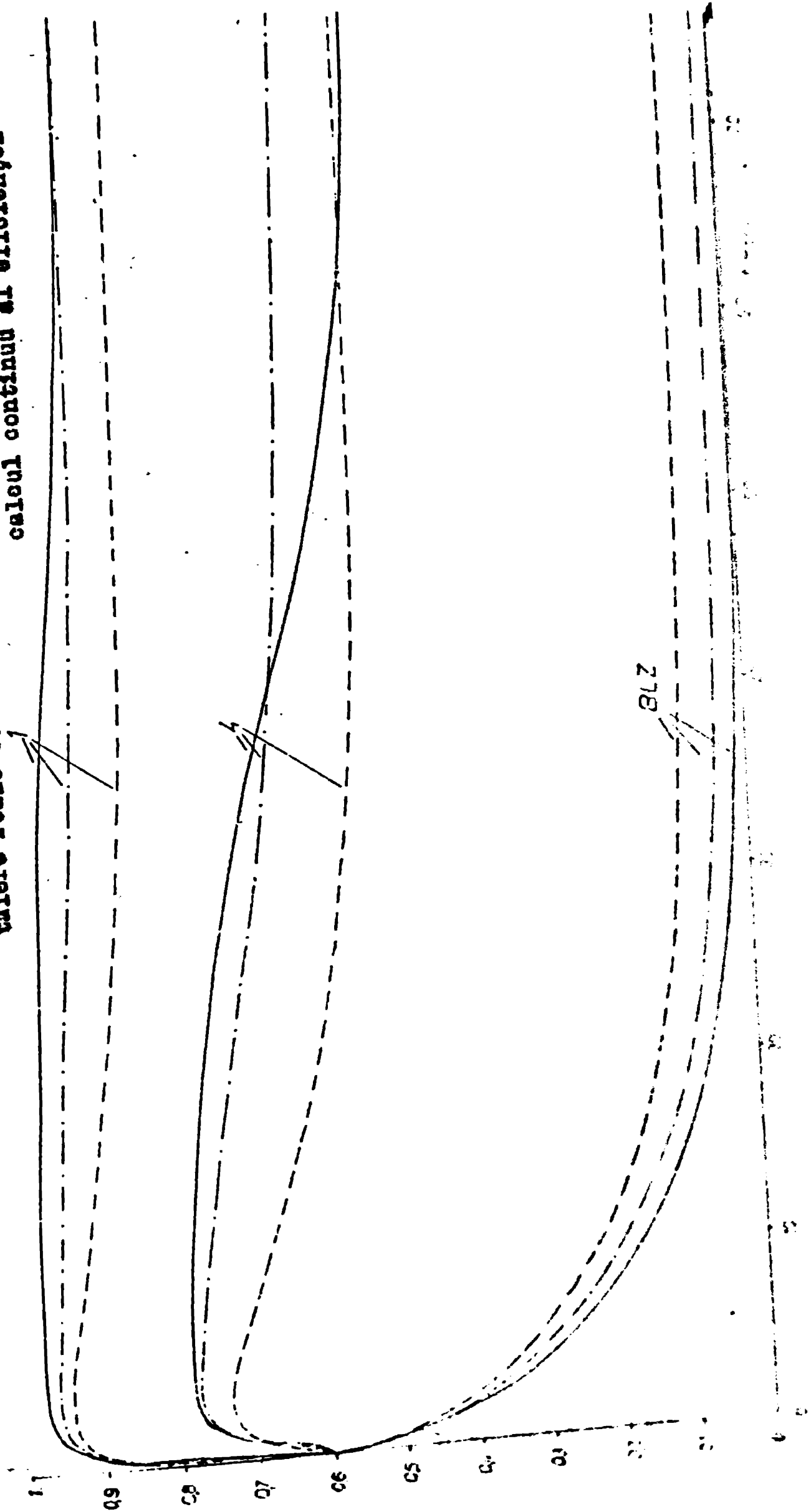
Evoluția în timp a concentrațiilor componentului ușor și respectiv cel greu pe talerele 1 și 4 (alimentare); <sup>b)</sup> în cele 3 cazuri (taler teoretic, taler real cu calcul periodic al eficienței și taler real cu calcul continuu al eficienței) este prezentată în figurile 3.2 și respectiv 3.3. Se observă

a) Aceste valori s-au determinat prin încercări. Valori mai mari conduc la destabilizarea metodei de integrare. Desigur că aceste valori depind de datele problemei, modificarea acestora implicînd fire necesitatea modificării pesului maxim, și posibilitatea majorării lui.

concentrației componentului

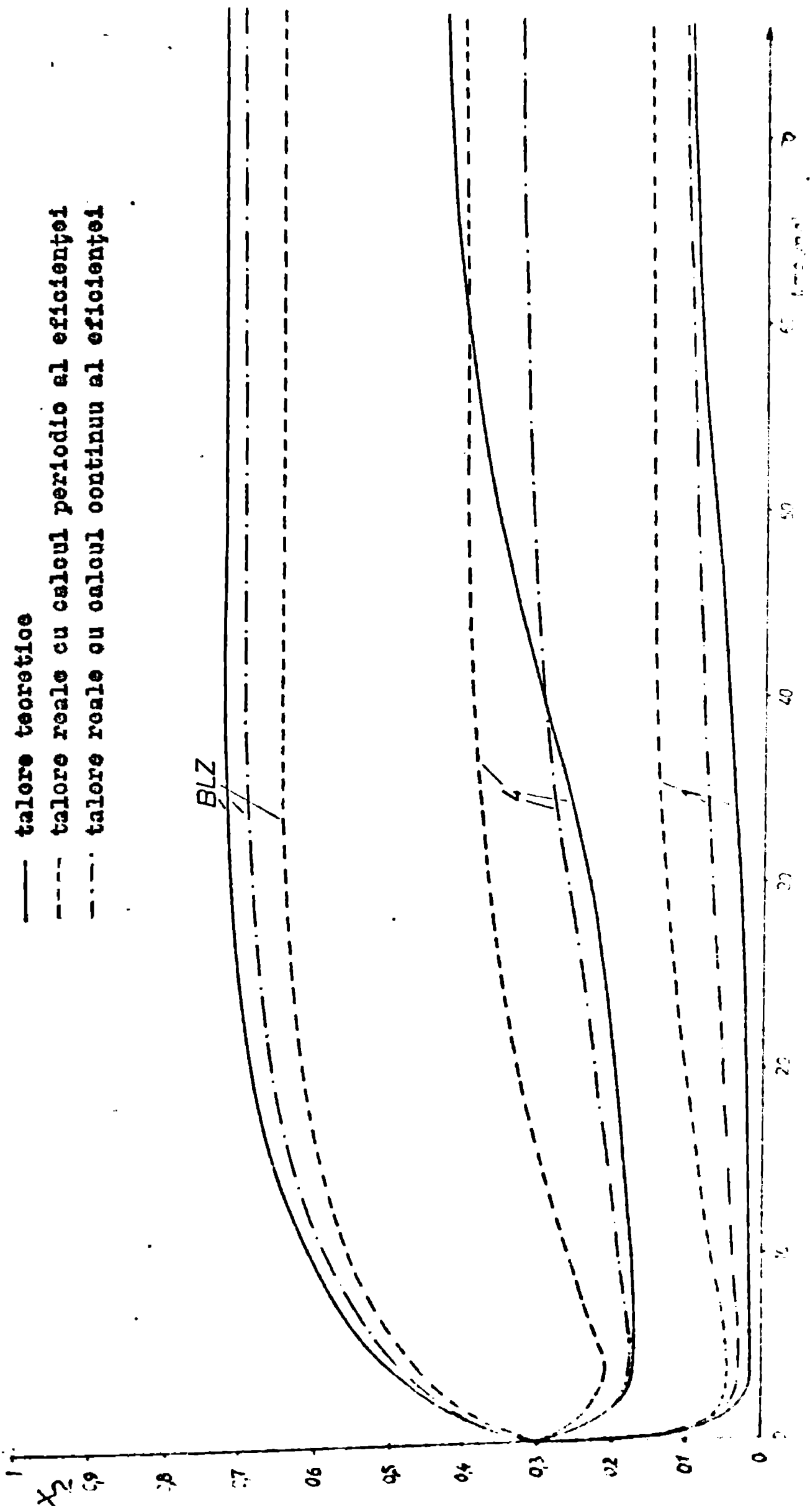
Fig.3.2. Variația în cursul perioadei de pornire a concentrării componentului în blas.

cheie ușor pe taleroale 1,4(alimentare) și în blas.  
talere teoretice —  
talere reale cu calcul periodic al eficienței - - - , respectiv cu  
calcul continuu al eficienței - · - · -



**Fig.3.3. Variația în cursul perioadei de pornire a concentrației componentului obete greu pe talerele 1,4(alimentare) și în blaz.**

- talore teoretice
- - - talore reale cu calcul periodic al eficienței
- · - · talore reale cu calcul continuu al eficienței



ă procedura de calcul periodic al eficacității introduce diferențe apreciable printr-un efect de acumulare progresivă a erorilor în cursul integrării numerice.

Polsoirea unor valori instantanee ale eficacităților (ce pot fi destul de fluctuante ca urmare ale unor fluctuații locale ale debitelor, respectiv vitezelor celor două faze) pentru seria ulterioară de incremente de timp este deci neindicată cu toată economia corespunzătoare de volum de calcule. În consecință respectivă procedură a fost abandonată pentru restul lucrării.

Răspunsurile dinamice pentru telerale din partea superioară a coloanei corespund unor curbe cu puncte de extrem, justificate de influența debitului de reflux. Blazul avînd un volum mare în comparație cu cel al unui teler (de circa 10 ori mai mare) prezintă o inerție corespunzătoare, astfel că variațiile în clasă sînt monotone. Acest fapt poate fi observat și în fig. 3.4 în care s-a reprezentat într-o diagramă spațială răspunsul în timp al temperaturii lichidului din fiecare teler real, inclusiv blazul. Se poate remarca că odată cu stingerea regimului staționar curbele respective devin linii drepte. Durata regimului tranzitoriu este mai mare la coloana funcționînd cu telere teoretice și realizînd un grad de separare mai avansat față de cea cu telere reale. Actul pentru coloana cu telere teoretice valoarea medie a derivatelor scade sub  $10^{-5}$  după 87 minute și sub  $10^{-6}$  după 111,41 minute, în timp ce pentru coloana cu telere reale valoarea medie a derivatelor devine  $10^{-5}$  după 76 minute și sub  $10^{-6}$  după 104,1 minute.

Profilurile finale la regim staționar pentru concentrații, temperaturi și presiuni în lungul coloanei sînt redate în fig. 3.5, aspectul lor avînd justificări teoretice ce nu necesită discutii.

Se remarcă, că pentru acest caz considerat, gradul final de separare obținut în coloana cu telere teoretice și <sup>real</sup> raportul de re-

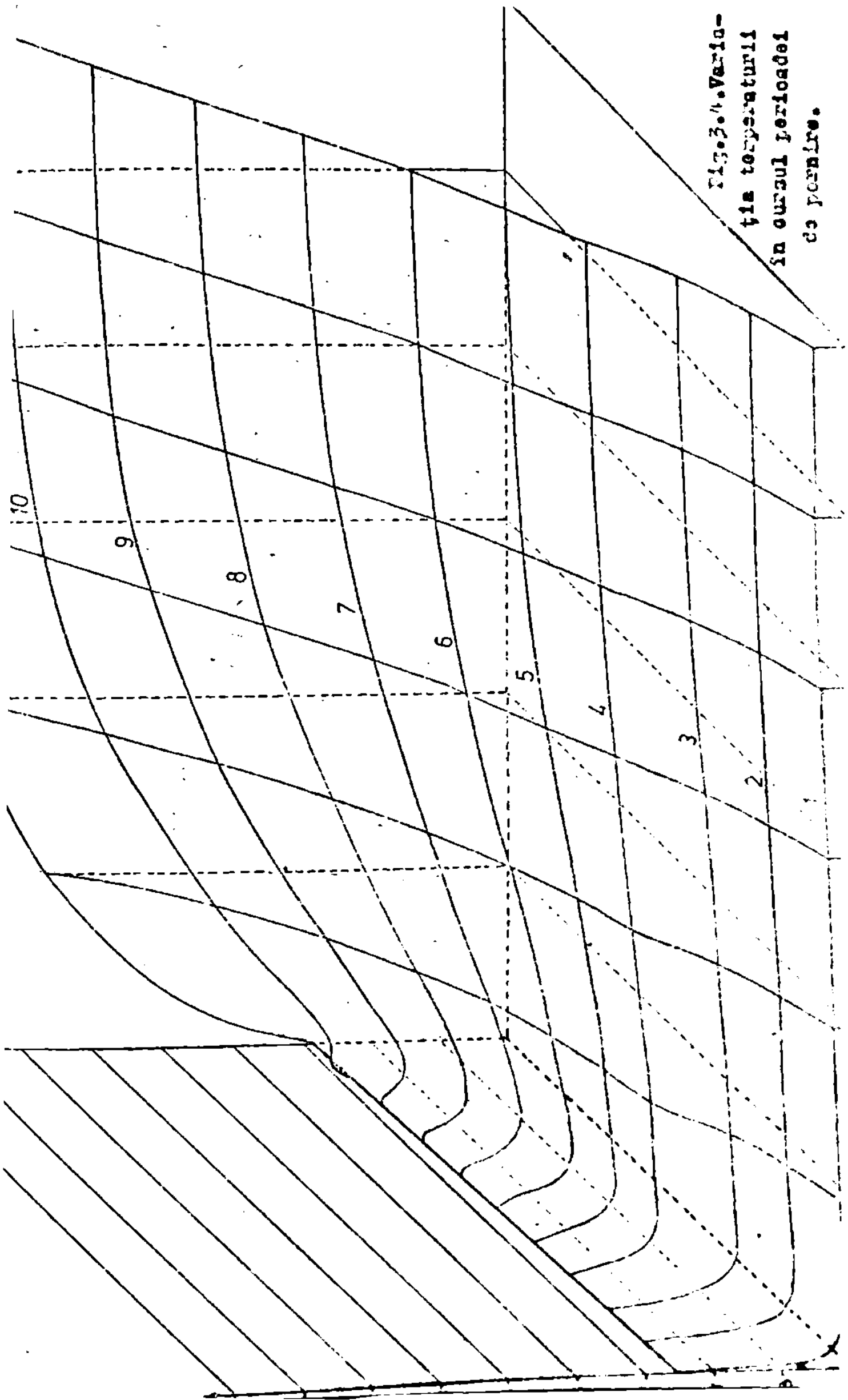


Fig. 3.4. Varia-  
 ția temperaturii  
 în cursul perioadei  
 de pornire.

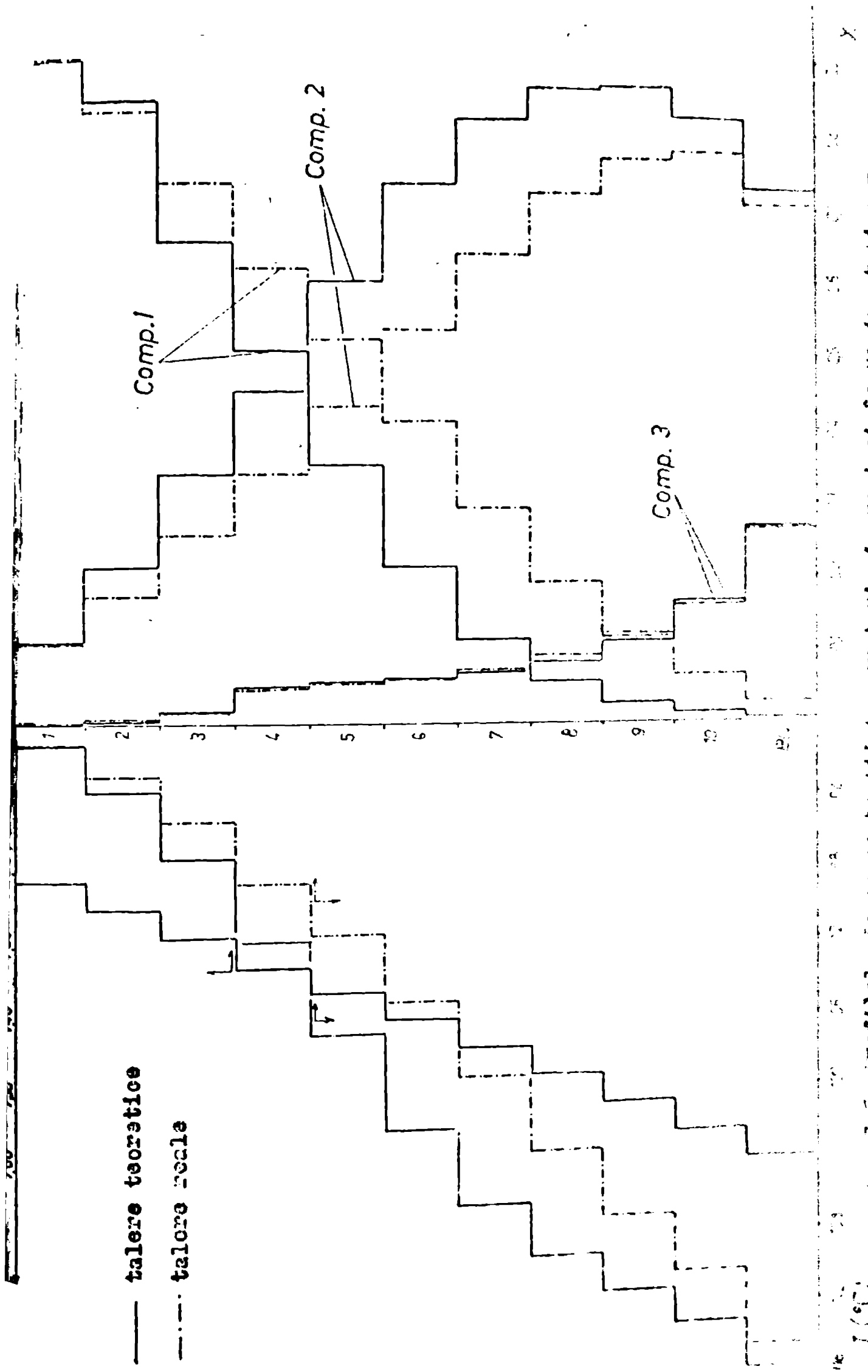


Fig. 3.5. Profilele de concentrare, temperaturi și presiuni în regiile staționare.

Flux propus metoda Gilliland indică valoarea 10,62 pentru numărul total de talere teoretice, în deplină concordanță cu cele 11 unități teoretice din exemplul abordat. Acest fapt era de așteptat având în vedere corespondența între tipul amestecului considerat și modul în care a fost elaborată metoda Gilliland (corelare de date industriale pentru amestecuri cu volatilități relative între 1,2 și 4,05 dând erori de până la 7% /20/).

O primă verificare mai importantă a modelului și algoritmului de rezolvare constă în testarea corespondenței între valorile temperaturii lichidului pe talere calculate prin integrarea numerică (respectiv valorile prezice prin ecii) și cele calculate prin relația 3.11 (respectiv temperaturile de fierbere). Cu alte cuvinte, s-a testat modul în care este respectată ipoteza stării terțice a lichidului de pe fiecare teler. Respectiva confruntare este redată în tabelul 3.3 fiind folosită pentru referință valorile la regim staționar pentru coloana de talere teoretice.

Este remarcabil faptul că diferențele între valorile integrate ale temperaturilor lichidului pe taler și cele exacte corespunzătoare respectivelor expoziții și precizii nu depășesc 0,5%. Aceasta constituie un argument deosebit de important al corectitudinii modelului original de calcul al temperaturii lichidului <sup>de</sup> pe talere în cadrul modelului propus (ecuația 3.23). În continuare o testare globală a modelului propus este realizată pe baza răspunsurilor date de sistemul reprezentând coloana de rectificare la diferite tipuri de semnale în fluxurile materiale incidente.



Tabelul 3.3

Nr. taler j	$x_{1j}$	$x_{2j}$	$x_{3j}$	$p_j$ (torr)
1	0,8370	0,2116	0,0014	721,2
2	0,7230	0,2116	0,0054	724,9
3	0,6465	0,3352	0,0183	728,6
4	0,5014	0,4467	0,0520	732,3
5	0,3491	0,5940	0,0569	736,2
6	0,2121	0,7253	0,0626	740,1
7	0,1157	0,8140	0,0703	744,0
8	0,0586	0,8576	0,0838	747,9
9	0,0281	0,8610	0,1110	751,9
10	0,0127	0,8215	0,1659	756,0
BLZ	0,0052	0,7269	0,2678	760,0

Continuare tabelul 3.3.

Nr. taler j	$T_j$ integrat (°C)	$T_j$ exact (°C)	Abateră relativă (%)
1	81,10	80,75	0,43
2	83,59	83,27	0,38
3	87,21	86,88	0,38
4	91,72	91,39	0,37
5	96,76	96,43	0,34
6	101,98	101,66	0,31
7	106,20	105,91	0,27
8	109,11	108,87	0,22
9	111,18	111,00	0,16
10	113,11	113,02	0,08
BLZ	115,69	115,70	<0,01

3.3.2. Testarea modelului cu ajutorul semnalelor treaptă

și oscilante

Utilizarea semnalelor de diferite tipuri constituie o practică curentă pentru verificarea modelelor proceselor în regim dinamic și pentru obținerea de informații utile pentru aplicațiile respective ale modelelor.

S-au folosit semnale treaptă pentru următoarele mărimi: debit de alimentare, raportul de reflux, încălzirea blazului, starea termică a alimentării și compoziția alimentării. Pentru fiecare semnal aplicat toate celelalte condiții de operare erau menținute nemodificate. S-a studiat pentru fiecare astfel de semnal răspunsul dinamic al sistemului corespunzător coloanei de rectificare cu parametrii constructivi și de operare menționați în paragraful anterior (variante cu talere reale). S-au confruntat stările staționare inițiale și finale rezultate ca urmare a respectivelor semnale. Rezultatele obținute sînt următoarele:

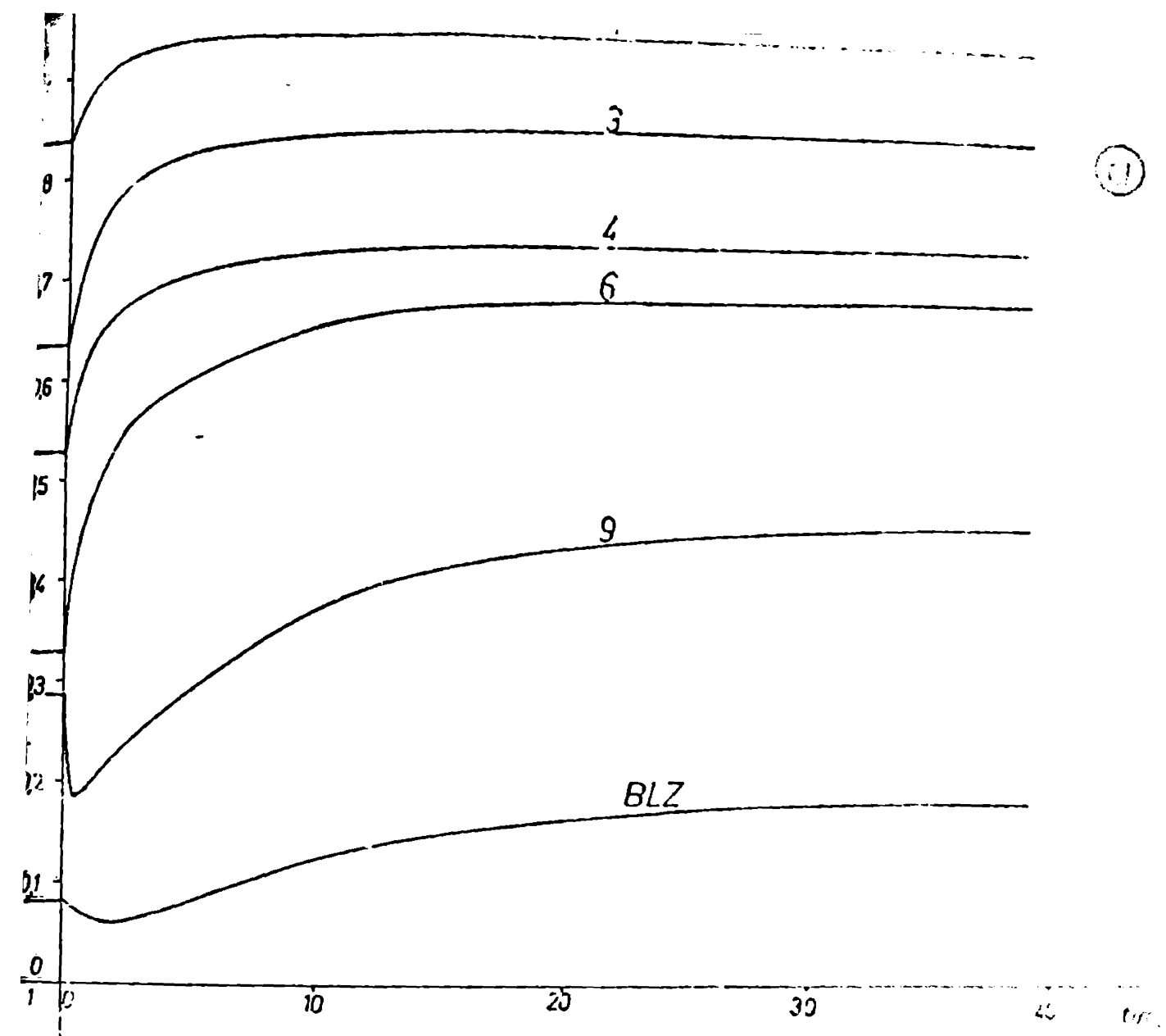
1. Majorarea debitului de alimentare cu 20% provoacă o scădere a temperaturii lichidului de pe talere în o anumită măsură cu noul bilanț termic, în care nu s-au modificat încălzirea blazului și raportul de reflux. Drept urmare crește pe fiecare taler concentrația componentului cheie ușor (fig. 3.6.a).

În caz de micșorare a debitului de alimentare cu 20% răspunsul este simetric invers (fig. 3.6.b). În cazul majorării debitului, cel mai lung regim tranzitoriu îl prezintă blazul datorită valorii mari a volumului său. În cazul micșorării debitului de alimentare, durata regimului tranzitoriu este determinată de talerele superioare puternic influențate de reflux (scăderea debitului de alimentare conduce la creșterea vaporizării și în condițiile menținerii constante a raportului de reflux și la creșterea debitului de reflux).

Creșterea debitului de alimentare conduce la scăderea duratei medii de staționare a lichidului în coloană, drept urmare și la scurtarea duratei de regim tranzitoriu.

2. Modificarea raportului de reflux în situație în care alimentarea coloanei și încălzirea blazului rămân ne schimbate are efecte similare cu cele obținute prin variația debitului

(a)



(b)

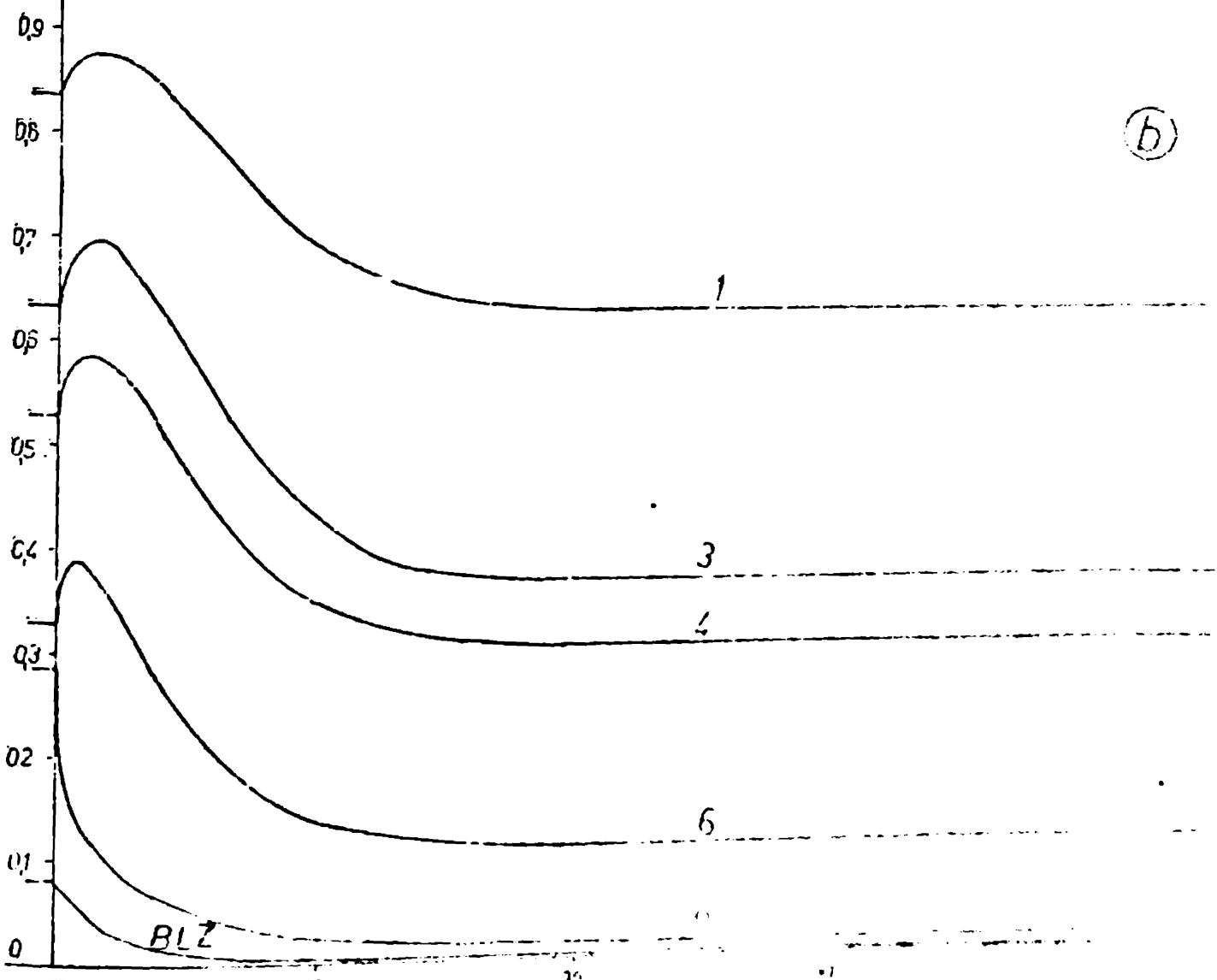


Fig. 2. Examination of the concentration of the component of the gas used in the reaction.

de alimentare. In fig. 3.7 a și b este reprezentat răspunsul concentrației componentului cheie ușor pentru creșterea și respectiv scăderea raportului de reflux cu 25%. Similaritatea răspunsurilor este pusă și mai bine în evidență de fig. 3.9<sup>a</sup> și b, în care s-a reprezentat variația concentrației componentului cheie

ușor și temperaturii între starea staționară finală și cea inițială (înainte de aplicarea semnalului treaptă respectiv). Explicația similarității acestor răspunsuri este dată de ecuația de bilanț termic global, pe întreaga coloană.

$$P [(R+1) r_D + h_D - h_W] + F (h_W - h_F) - Q_1 = 0 \quad (3.76)$$

în care indicii D, F și W se referă la distilat, alimentare și blaz, P este debitul total de alimentare, iar cum s-a menționat P reprezintă producția de distilat și  $Q_1$  fluxul de căldură pentru încălzirea blazului.

Se constată că durata regimului tranzitoriu nu este influențată semnificativ de valoarea intrinsecă a raportului de reflux.

3. Participând în ecuația de bilanț termic global în termeni având aceleași semn, treptele de variație a încălzirii blazului  $Q_1$  și a entalpiei molare a alimentării  $h_F$  conduc la răspunsuri similare ale procesului (fig. 3.9, a și b). Semnalele care s-au introdus în acest sens au fost: creșterea entalpiei molare a alimentării  $h_F$  conform modificării stării termice a alimentării de la  $q = 1$  la  $q = 0,9$  unde parametrul  $q$  este definit astfel /27, 28, etc.).

$$q = \frac{H - h_F}{H - h} \quad (3.77)$$

$h$  și  $H$  fiind entalpiile molare ale condensatului și vaporilor saturanți corespunzători amestecului de alimentare.

- scăderea entalpiei alimentării  $h_F$  conform modificării stării termice a alimentării de la  $q = 1$  la  $q = 1,2$ .

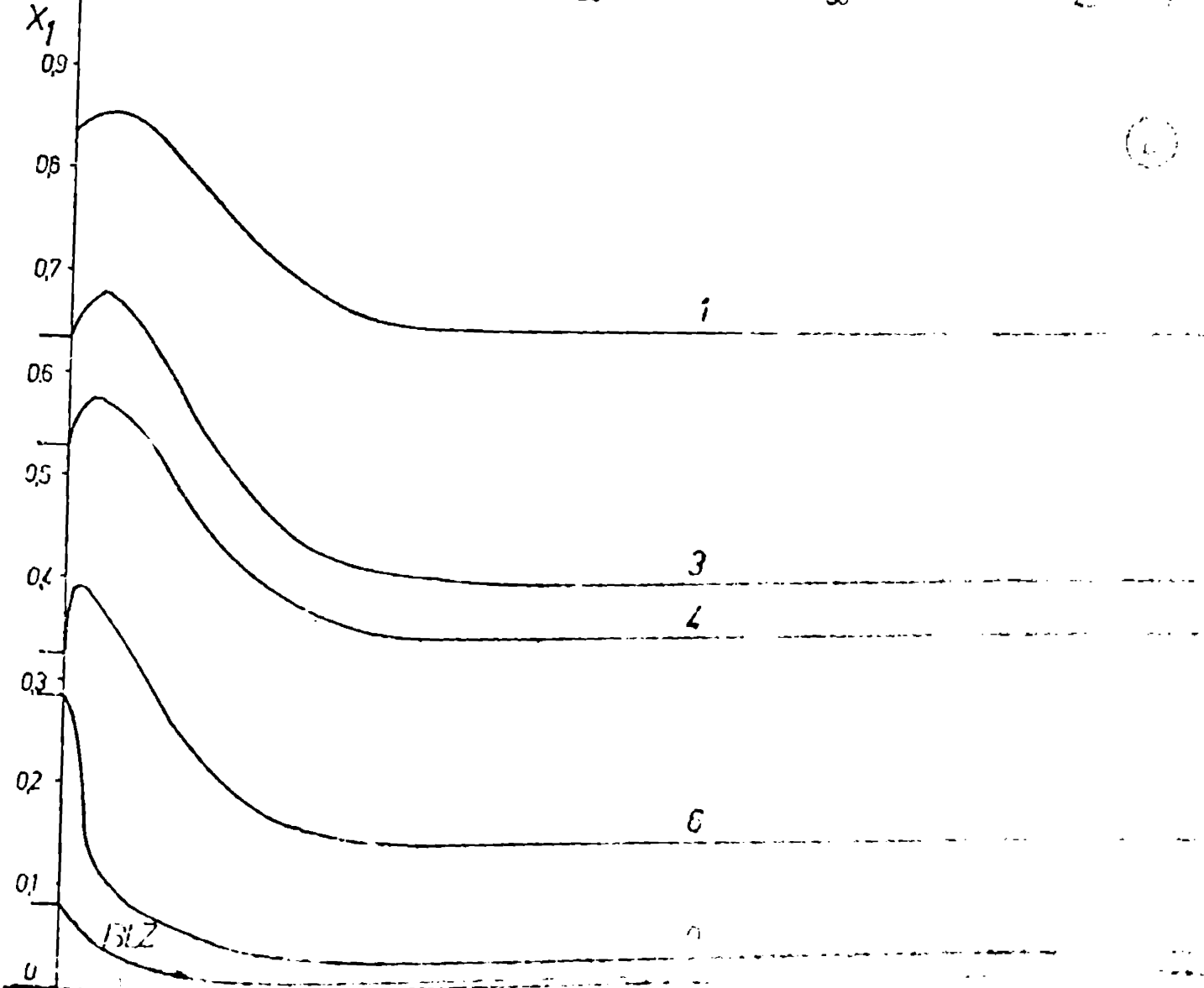
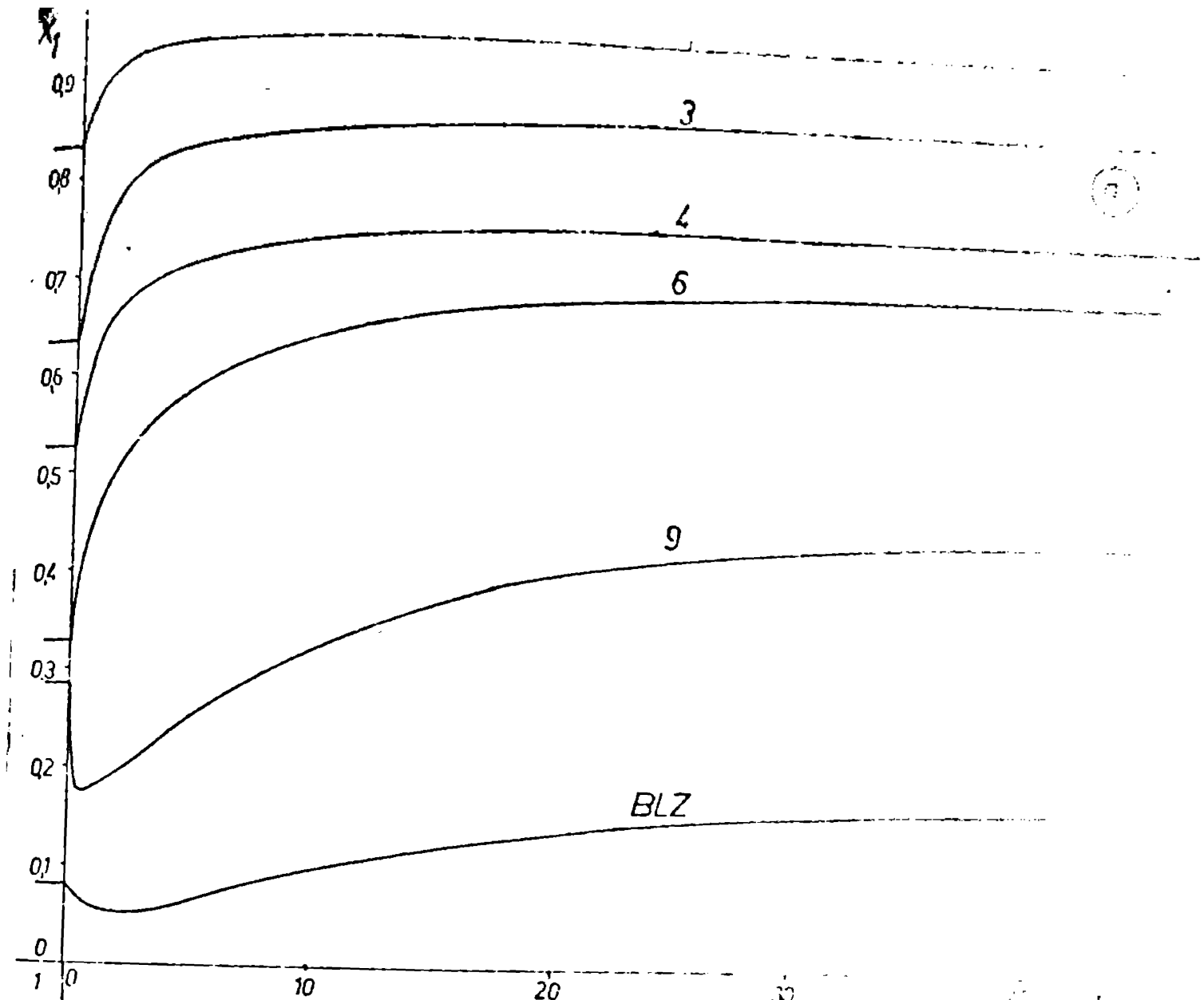


Fig. 2. Example of the concentration of the component over the same time interval.

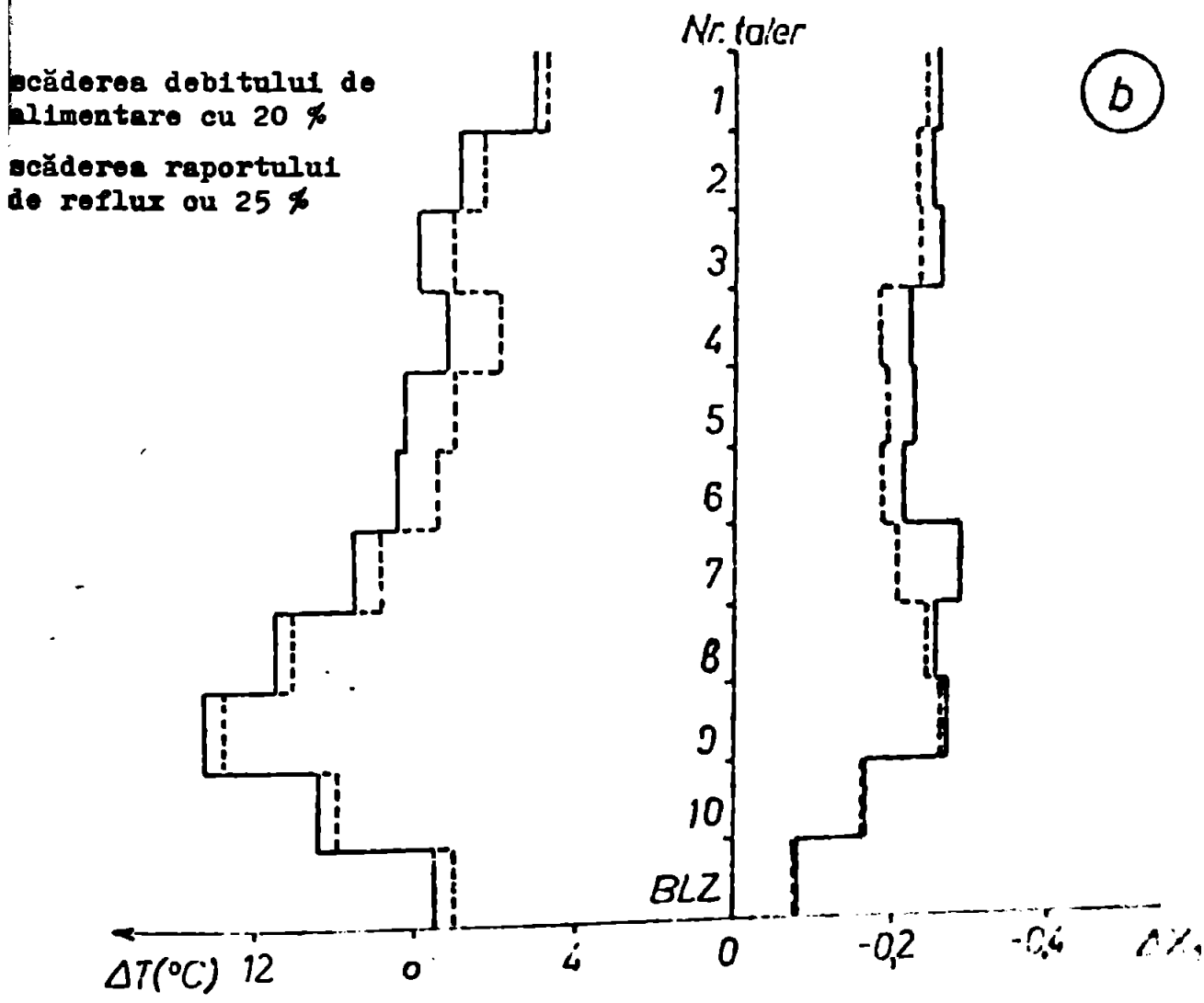
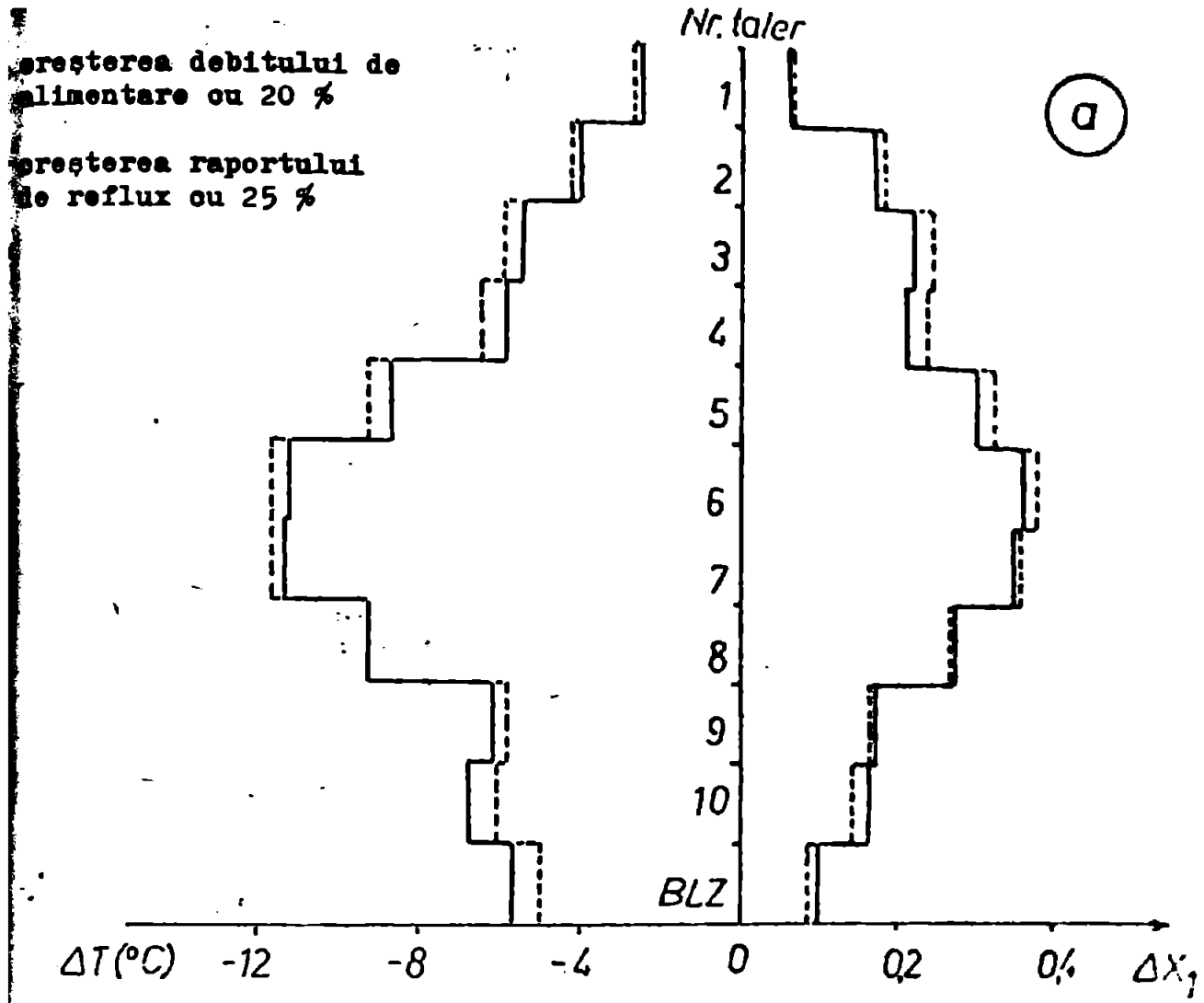


Fig. 3.8. Variația concentrației componentului cheie ușor și a temperaturii între cele două stări staționare pentru cazul treaptă.

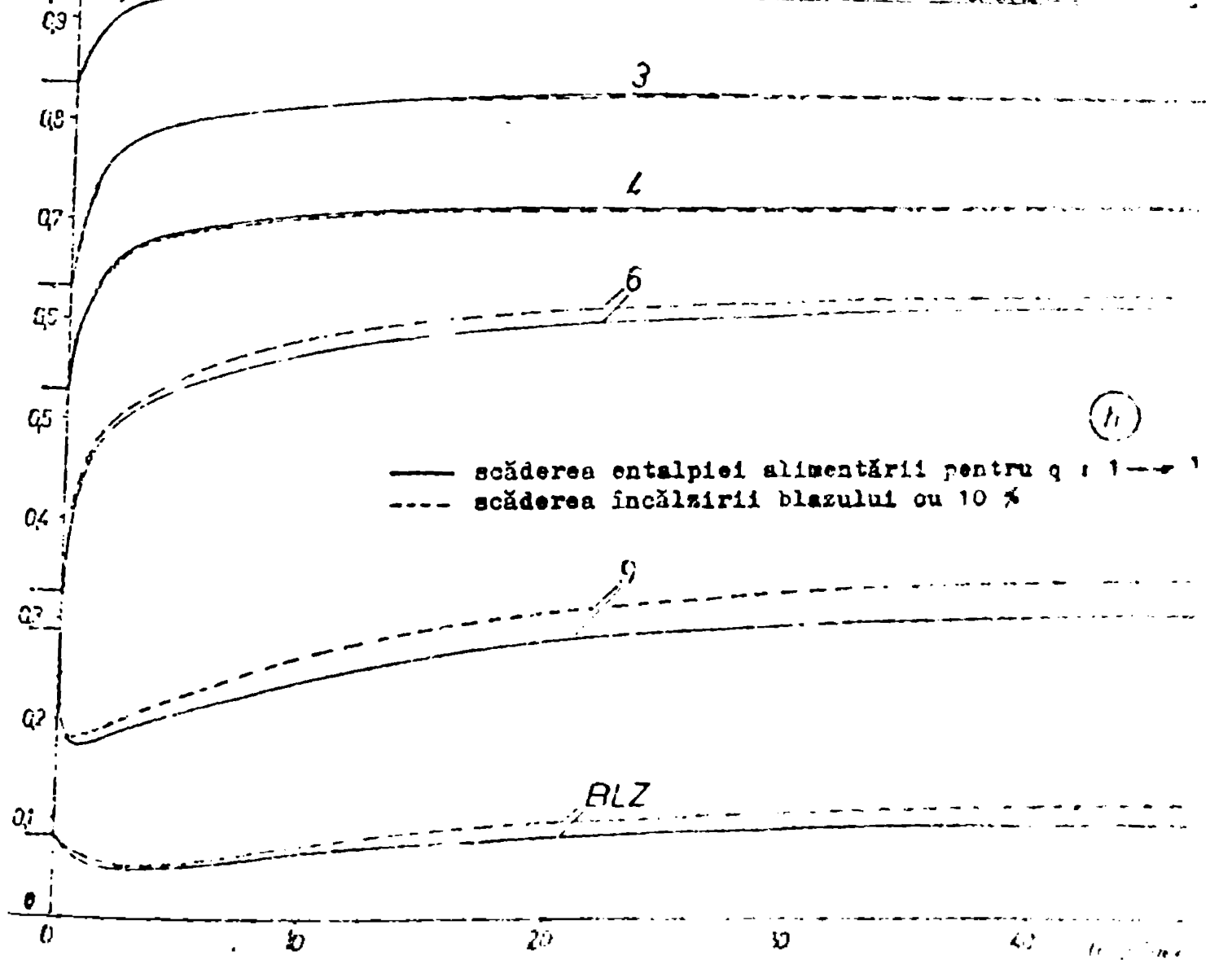
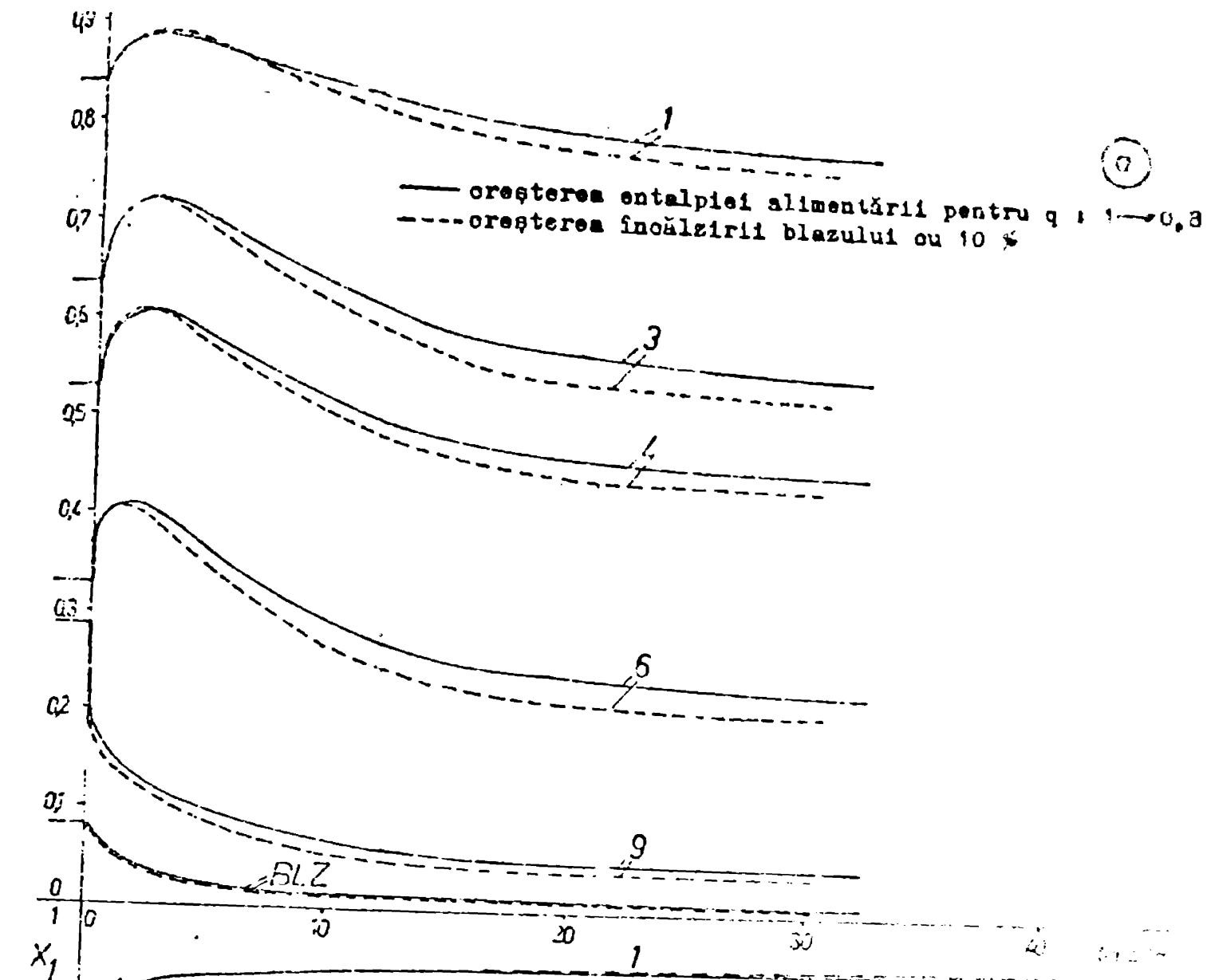


Fig. 3.9. Răspunsul concentrației componentului cheie ușor la semnale treaptă.

- creșterea și scăderea fluxului de căldură transferată în blaz cu 10%.

Creșterea aportului de entalpie introdusă în coloană conduce la majorarea temperaturii și în consecință scăderea concentrației componentului cheie ușor în favoarea celui greu (fig. 3.9a) și invers în caz de scădere a aportului de entalpie (fig. 3.9 b).

De asemenea creșterea aportului de entalpie conduce la creșterea debitului de vapori și respectiv de reflux (la raport constant de reflux) scade durata medie de staționare pe talere; drept urmare aceasta conduce la durate de regim tranzitoriu mai reduse decât în cazul în care scade aportul de entalpie introdusă în coloană.

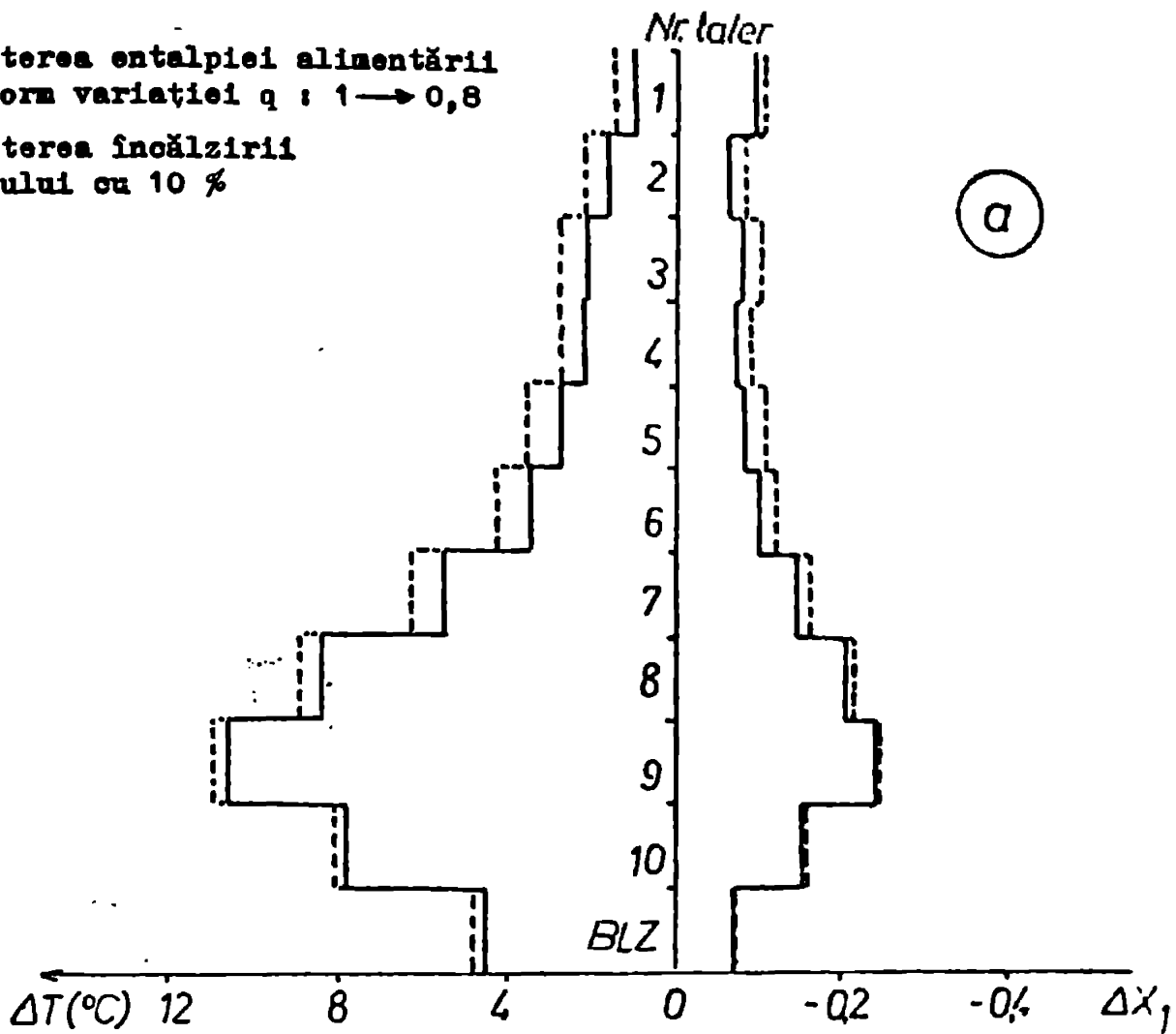
În fig. 3.10 a și b e-a reprezentat variația concentrației componentului cheie ușor și temperaturii între starea staționară finală și cea inițială pentru respectivele reține aplicate stării termice a alimentării și încălzirii blazului.

Ca și în cazul variațiilor debitului de alimentare și refluxului și pentru variațiile entalpiilor de alimentare sau încălzire modificările concentrațiilor și temperaturilor între staționare pentru telerile situate aproximativ la mijlocul zonei de epuizare (vezi fig. 3.8 a, b și 3.10 a, b), respectiv telerile 6-9. Rezultatul concordă cu constatările similare prezentate în lucrarea /36/, obținute la simularea dinamică a unei coloane de separare a amestecului etilenă-etan, folosind însă un model matematic mai simplu. Se apreciază în respectivele lucrări că aceste telerile prezintă o importanță deosebită pentru aplicarea tehnologiilor sistemelor de reglare automată a procesului de separare.

4. Un ultim semnal treaptă aplicat a fost scăderea concentrației de alimentare a componentului cheie ușor, cu o creștere și respectiv o scădere de 10%. Concentrațiile celorlalți componente

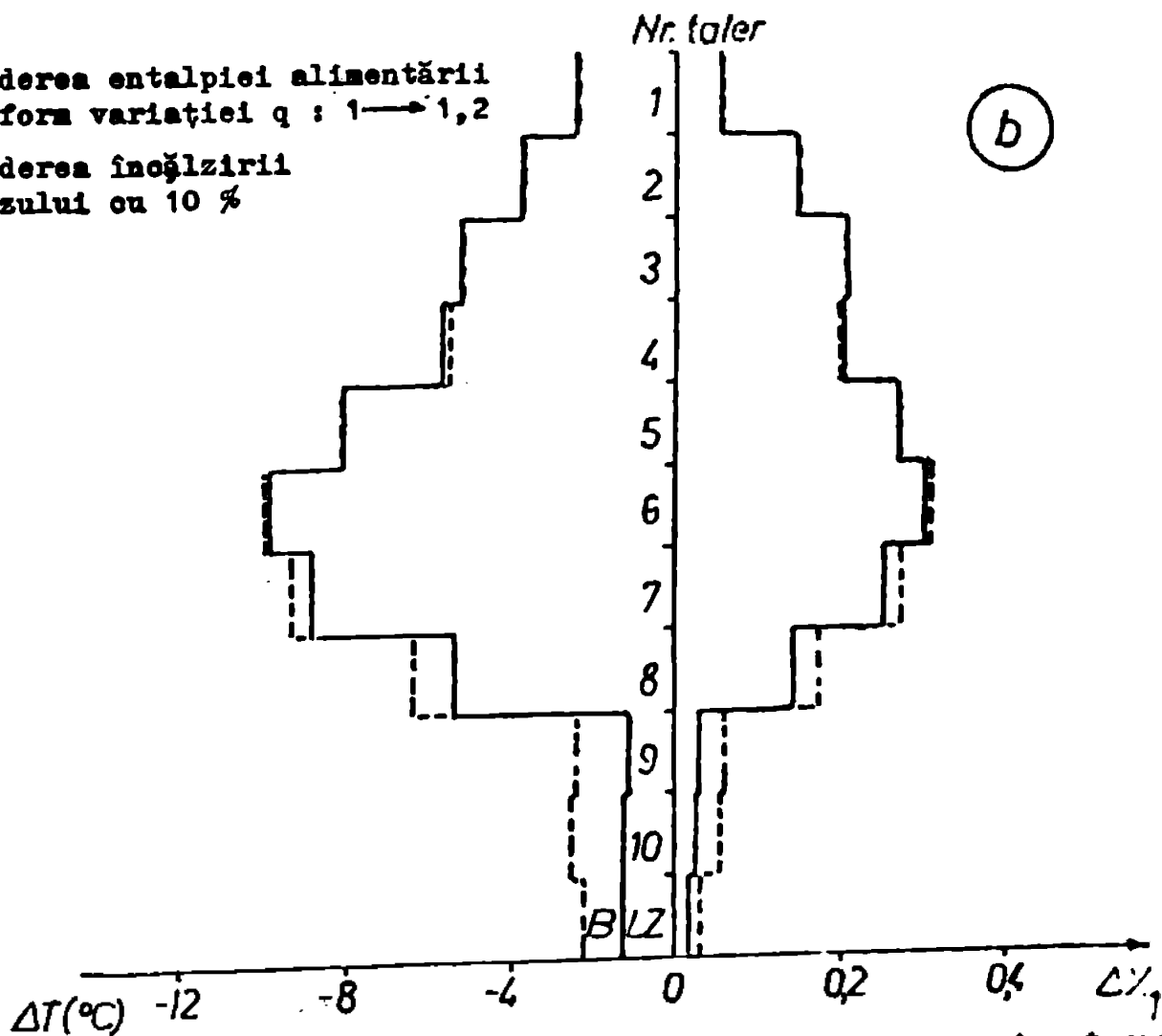


creșterea entalpiei alimentării  
conform variației  $q : 1 \rightarrow 0,8$   
- creșterea încălzirii  
blazului cu 10 %



(a)

scăderea entalpiei alimentării  
conform variației  $q : 1 \rightarrow 1,2$   
--- scăderea încălzirii  
blazului cu 10 %



(b)

Fig. 5.10. Variația concentrației componentului cheie ușor și a temperaturii între cele două stări staționare pentru sursă treaptă.

ponenți au fost corespunzătoare cu raportul lor inițial (3:1). Rezultatele rezumate în fig. 3.11 a și b și 3.12 a și b sînt cele previzibile: îmbogățirea amestecului de alimentare cu component onică ușor, conduce la creșterea în întreaga coloană a concentrației acestuia, iar scăderea concentrației componentului onică ușor în alimentare are ca efect și scăderea corespunzătoare a concentrației sale în întreaga coloană. Și în acest caz variațiile maxime se obțin pe telerile 6-9.

Un rezultat mult mai spectaculos s-a obținut prin introducerea asupra concentrației de alimentare a componentului onică ușor a unui semnal oscilant, natura și scopul acestuia fiind pur teoretice.

Amplitudinea semnalului a fost de 10% din valoarea medie, iar perioada  $T = 48$  secunde. În consecință, ecuația de variație cu timpul  $t$  a concentrației componentului onică ușor în alimentare este:

$$x_{1p} = 0,6 + 0,1 \sin \frac{2\pi}{T} t \quad (3.78)$$

Concentrațiile celorlalți doi componente au oscilat sikilar păstrându-se constant raportul lor inițial de 3:1.

Durata simulării a fost de 50 de perioade (10 minute) pentru a se asigura stabilizarea răspunsului. În fig. 3.13 este reprezentat răspunsul concentrației pe teleră a componentului onică ușor în cursul primelor și ultimelor 4 perioade.

Se observă că răspunsul la fiecare element (teler) respectă elura semnalului - avînd aceeași perioadă dar amplitudini și faze diferite; amplitudinea este maximă pe telerul de alimentare și scade progresiv în telerile inferioare devenind practic nulă pentru blaz. Amplitudinea scade foarte repede la telerile de deasupra celui de alimentare unde transmiterea semnalului se face prin intermediul decitului de vapori și unde intervine și efectul

de staționare a refluxului. Răspunsurile sînt defazate în timp corespunzător întârzierii pe care o introduce fiecare teler.

Propunînd ecuația pentru variația în timp a concentrației componentului cheie ușor de pe telerul  $j$ :

$$x_{1j} = \bar{x}_{1j} + A_{1j} \sin \left( \frac{2\pi}{T} t - \Delta\varphi_j \right) \quad (3.79)$$

s-au calculat din valorile instantanee  $x_{1j}$  la timpi diferiți, pe parcursul ultimei perioade simulate, valorile concentrațiilor medii  $\bar{x}_{1j}$ , amplitudinii  $A_{1j}$  și defazajului  $\Delta\varphi_j$ .

Valoarea defazajului unghiular  $\Delta\varphi_j$  s-a transformat în unități de timp conform relației corespunzătoare:

$$\Delta t_j = \Delta\varphi_j \frac{T}{2\pi} \quad (3.80)$$

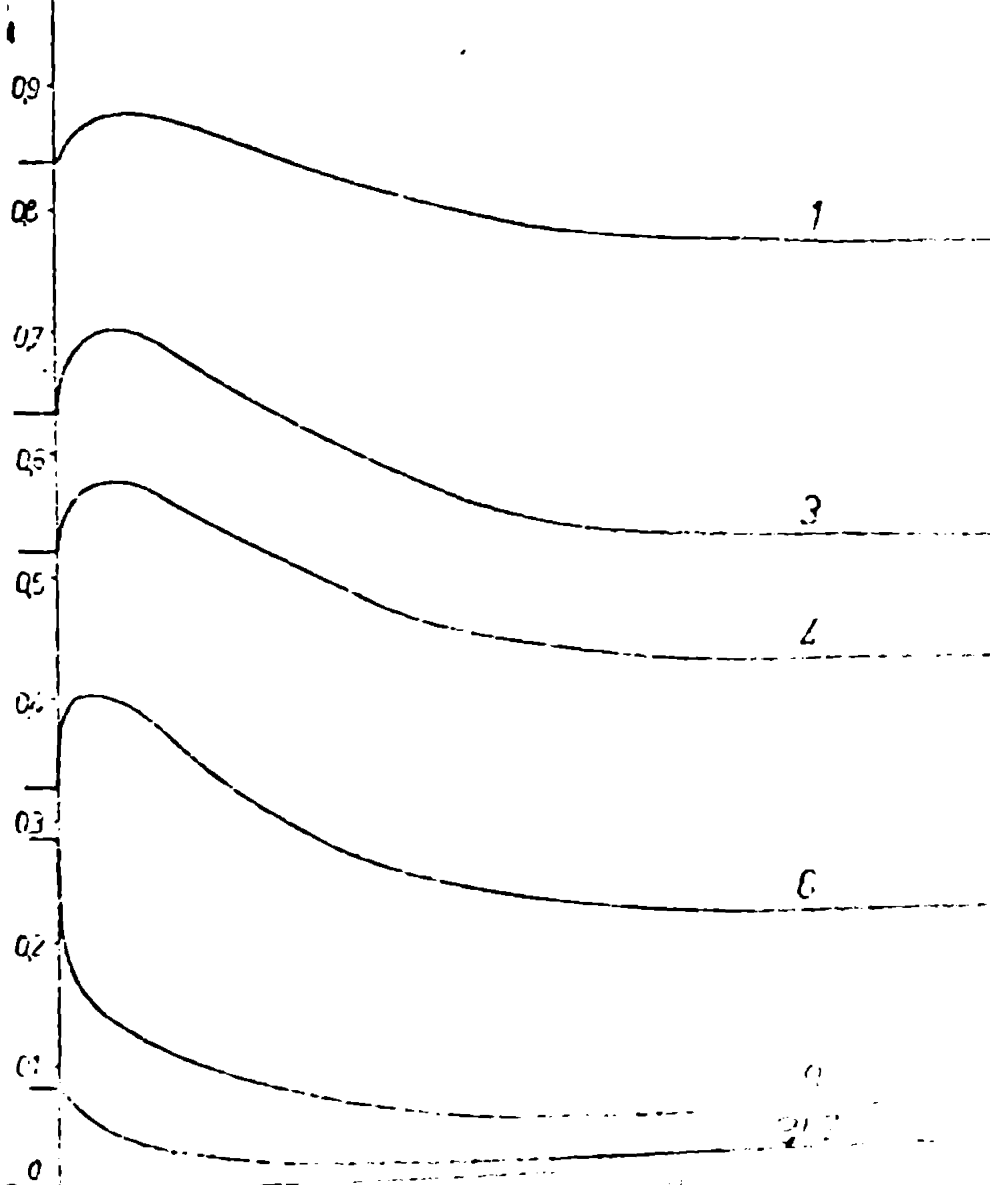
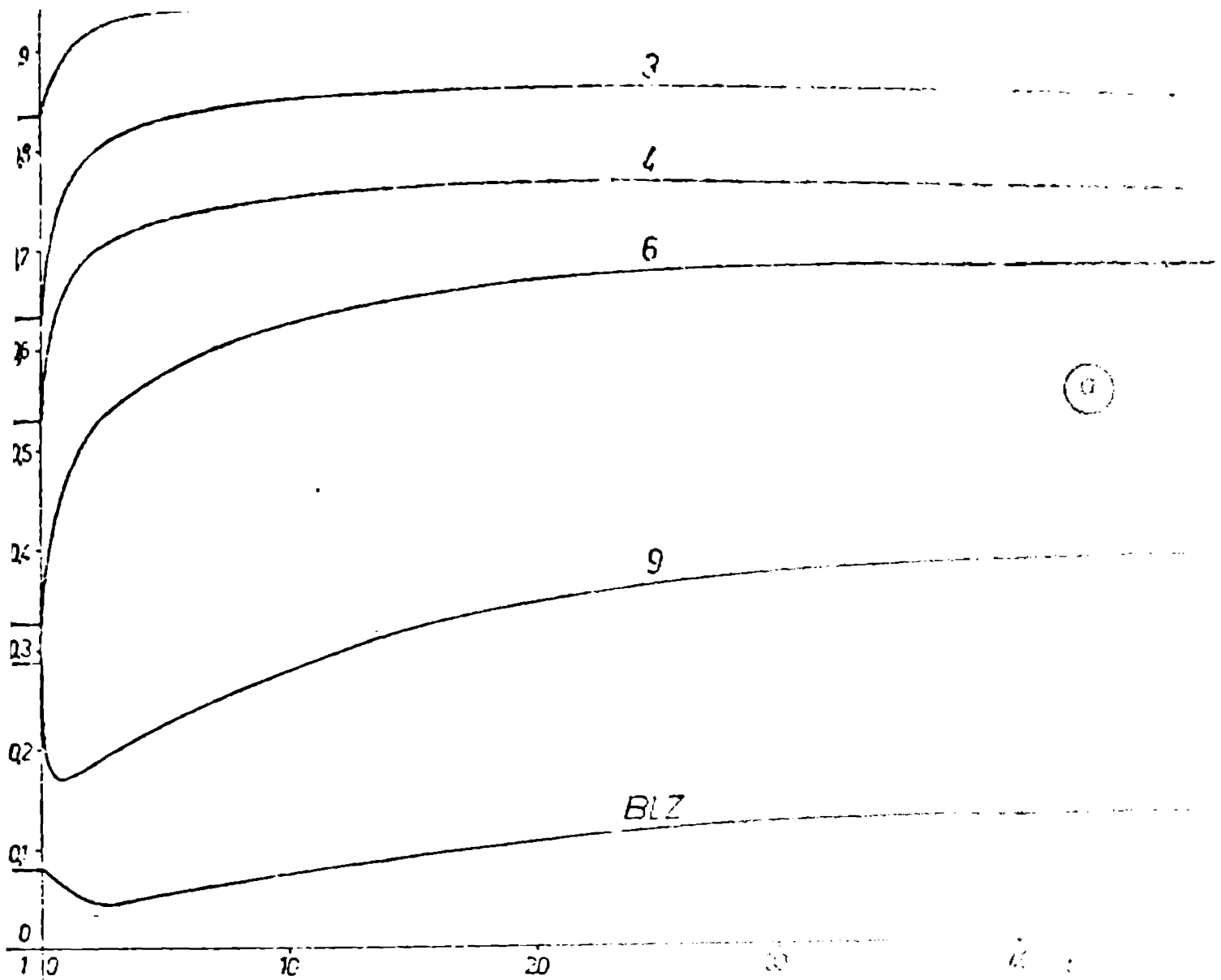
S-a calculat de asemenea durata medie de staționare a lichidului pe teler  $\bar{t}_{L_j}$  ca raport între volumul telerului și ieșitul volumetric de lichid de curge de pe fiecare teler. Rezultatele sînt prezentate în tabelul 3.4, unde  $(x_{1j})_0$  reprezintă valorile inițiale staționare ale concentrației componentului 1 pe telerul  $j$ .

Se pot trage următoarele concluzii importante și interesante:

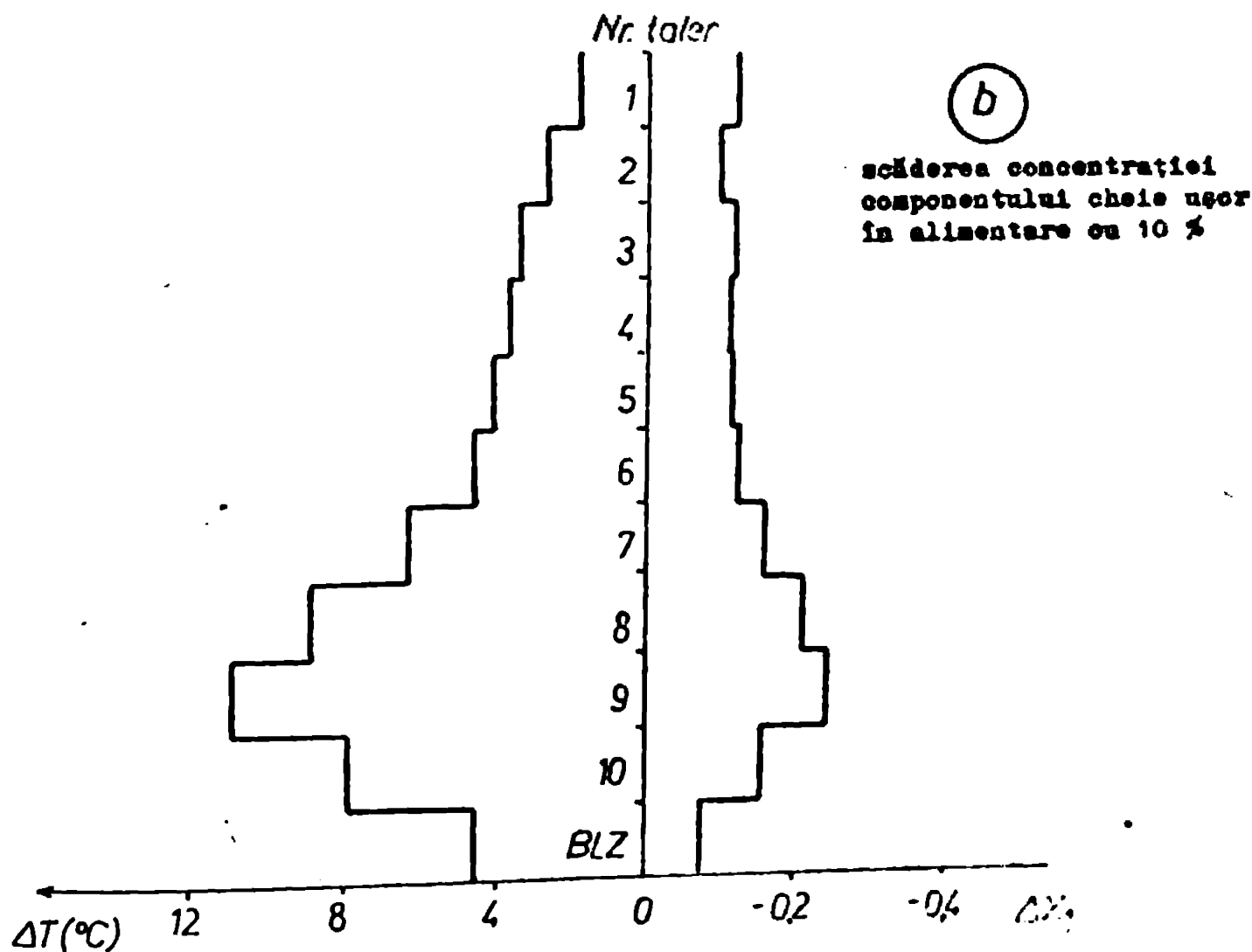
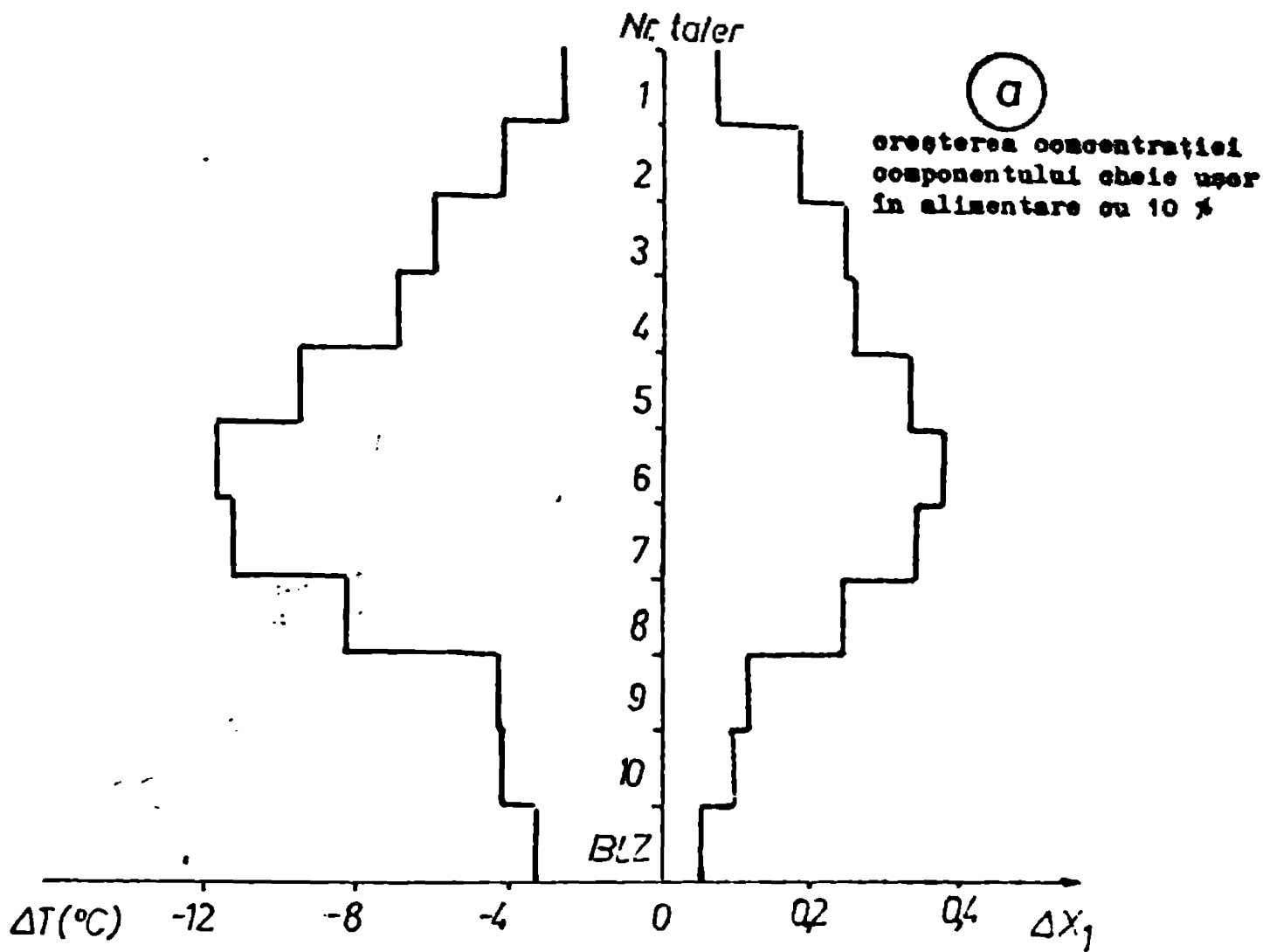
- funcționarea coloanelor de rectificare în regim oscilant al concentrațiilor de alimentare nu conduce la îmbunătățirea separării prin intensificarea transferului de masă, datorită modificării continue a forței de acțiune a "fenomenului de trecere".

Influența altor oscilații (dusit de alimentare de ex.) asupra transferului de masă va putea fi studiată pe modelul expus după o completare corespunzătoare a aspectelor de hidrodinamică;

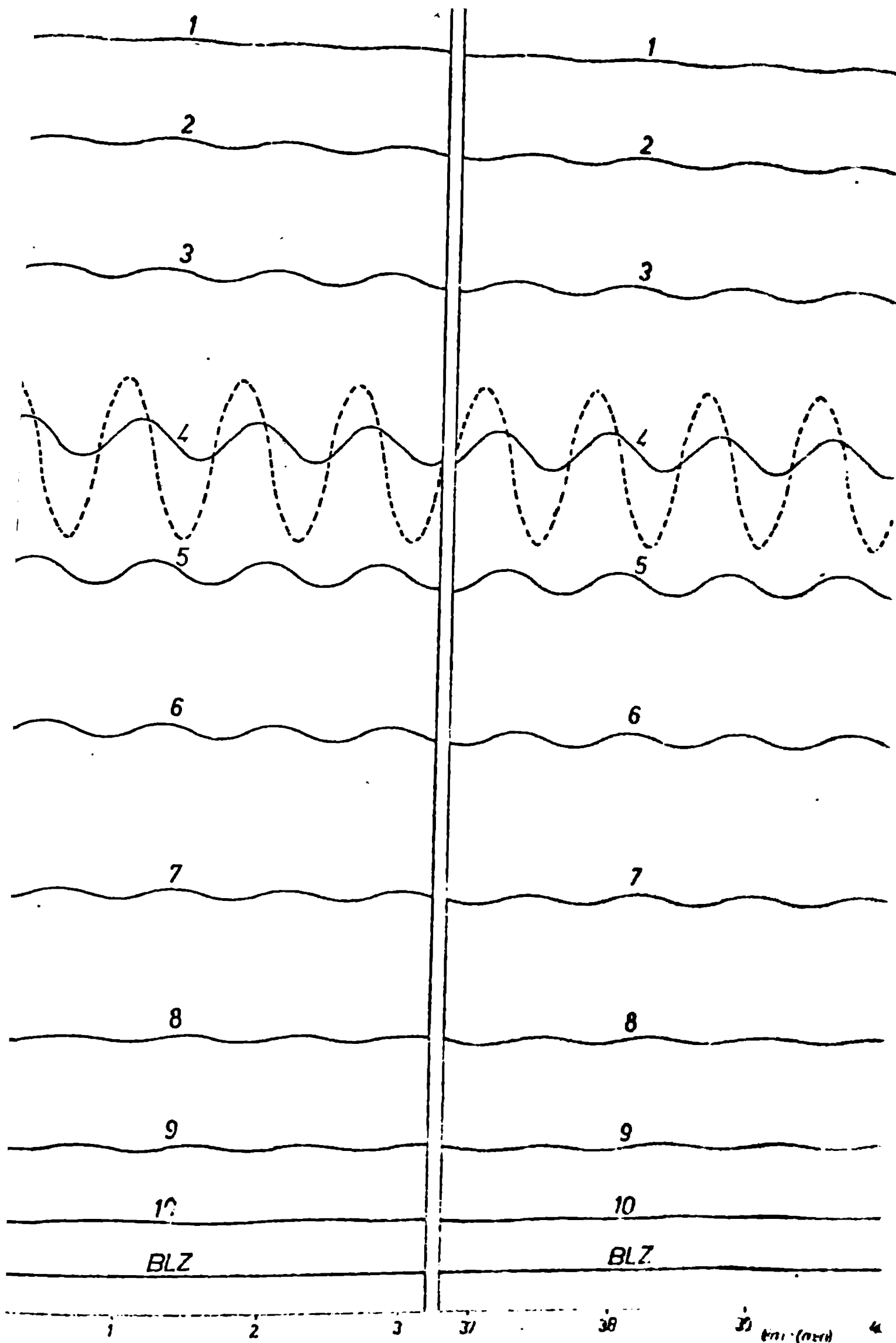
- duratele de întârziere a răspunsului pentru fiecare element (teler) în raport cu semnalul este practic egală cu timpul



3.11. Răspunsul concentrației componentului scade în la scara de  
 restarea blocaderea concentrației de alimentare și răspunsul...



**Fig.5.12.** Variația concentrației componentului cheie ușor și a temperaturii între cele două stări staționare pentru senzal treaptă.



3.13. Răspunsul concentrației componentului cheie user (—) la semnal oscilant pe concentrația de alimentare a aceluiași component (----).

Tabelul 3.4

seriul j	$(x_{1j})_0$	$\bar{x}_{1j}$	$A_{1j}$	$\Delta t_j$ sec	$\bar{t}_{L_j}$ sec	$\sum_{k=1}^j \bar{t}_{L_k}$ sec	$\left[ \frac{\Delta t_j}{\sum_{k=1}^j \bar{t}_{L_k}} - 1 \right] \cdot 100$ %
1	0,8893	0,88920	0,00114	12,95			
2	0,8181	0,81795	0,00213	17,24			
3	0,7264	0,72620	0,00412	13,87			
4	0,6116	0,61145	0,01330	5,88	5,73	5,73	2,62
5	0,5185	0,51830	0,00808	10,96	5,68	11,41	-3,94
6	0,4073	0,40710	0,00460	16,58	5,60	17,01	-2,53
7	0,2928	0,29260	0,00232	23,21	5,52	22,53	3,02
8	0,1925	0,19230	0,00194	28,60	5,43	27,96	2,29
9	0,1166	0,11650	0,00134	32,46	5,35	33,31	-2,55
10	0,0656	0,06555	0,00065	35,41	5,32	38,63	-8,34
BLZ	0,0278	0,02775	$< 10^{-4}$				

mediu de staționare acumulat de la locul semnalului (tabelul 4) și pînă la elementul respectiv. Diferențele relative procentuale între aceste mărimi expuse în ultima coloană a tabelului 3.4 sînt de 2-3 procente și într-un singur caz 8,34% și se datorează în mare parte erorilor la calculul necunoscutelor din ecuația (3.79), deoarece s-a dispus de date cu numai 4 rezonanțe. Această comportare este tipică pentru amortizarea fluctuațiilor unui proces caracterizat printr-un așa zis model "celular" /51/ cum este și în cazul de față.

Răspunsurile adecvate obținute în urma introdușerii diferitelor tipuri de semnale sînt un argument important în favoarea corectitudinii noului model propus pentru simularea finierii a fractionării prin rectificare a semnalelor multicomponente.

### 3.3.3. Testarea modelului pe bază de determinări experimentale.

O verificare suplimentară a modelului anterior elaborat

s-a fost efectuată prin confruntarea cu răspunsul dinamic obținut în urma introducerii unui semnal treaptă într-o coloană de rectificare de laborator.

Instalația experimentală pe care s-a făcut determinările a constat într-o coloană de rectificare de sticlă având 17 țelere cu olopotei și diametrul interior de 0,023 m. Pentru blazul coloanei s-a folosit un balon cu 4 gaturi fiind prevăzut cu manometru, termometru și pîlnie cu ventil pentru alimentare. Blazul a fost etalonat volumetric pentru a permite măsurarea cantității de lichid, iar încălzirea s-a făcut electric, cu posibilitate de variație a fluxului caloric cu autotransformator ATB 8. S-a folosit cap refrigerant de distilare prevăzut cu termometru și măsurător de reflux la vârful coloanei. Presiunea la vârful coloanei, refrigerantului fiind deschis, este cea atmosferică, fiind citită la barometrul din laborator.

Pentru adiabaticizare coloana a fost izolată în spumă poliuretanică. S-a lucrat cu amestecul binar benzen-toluen, cei doi componenți fiind inițial purificați separat prin distilare și ținuți pe sodiu pentru eliminarea umidității. Puritatea componenților a fost verificată refractometric.

Intr-o primă etapă a determinărilor experimentale s-a încălzit blazul coloanei cu amestecul menționat în raportul a celor benzen/toluen 1:1. Lucrînd la reflux total s-a studiat coloana la regim staționar corespunzător stingerii valorilor constante ale temperaturilor în vîrf și blaz și debitului de lichid refluxat. Pentru respectivele valori staționare  $T_D = 80,5^\circ$ ;  $T_W = 98,0^\circ$ ;  $P_D = 769$ , torr  $P_W = 777$  torr și utilizînd presiunile de vapori obținute cu ecuația Antoine (2.82), respectiv  $P_{1D} = 769,37$  torr;  $P_{2D} = 295,87$  torr;  $P_{1W} = 1278,56$  torr;  $P_{2W} = 522,73$  torr, s-au calculat compozițiile corespunzătoare din vîrf și blazul coloanei



$x_{1D} = 0,999$ ;  $x_{2D} = 0,001$ ;  $x_{1W} = 0,3364$ ;  $x_{2W} = 0,6636$ .  
În conformitate cu valorile lui  $T_D$ ,  $x_{1D}$  și  $x_{2D}$  s-a calculat cu ajutorul relațiilor (2.83) și (2.90) căldura latentă de vaporizare a distilatului  $r_D = 3,0759 \cdot 10^7$  J/Kmol. Folosind această valoare și pe cea a debitului de lichid refluxat  $L_R = 7 \cdot 10^{-7}$  kmol/s (stabilit în debitul volumetric măsurat ținând cont de compoziție și temperatură) și având în vedere adiabaticizarea coloanei s-a determinat fluxul net de încălzire a plăzii  $Q_f = L_R \cdot r_D = 22$  W (valoare foarte plauzibilă pentru regimul încălzitorului electric de 106 W).

Conform valorii măsurate a volumului de lichid existent în plac la regim staționar  $V_W = 130$  cm<sup>3</sup> rezultă, în concordanță cu  $T_W$ ,  $x_W$ ,  $x_{2W}$  și densitățile corespunzătoare ale celor doi componente (rel. 2.85), respectivele cantități din plac  $n_{1W} = 0,3088$  mol și  $n_{2W} = 0,7669$  mol.

În conformitate cu presiunile de vapori din vîrf și plac coloanei volatilitățile relative sînt  $\alpha_D = 2,60$  și  $\alpha_W = 2,446$  rezultînd valoarea medie pe coloană a volatilității  $\bar{\alpha} = \sqrt{\alpha_D \alpha_W} = 2,52$ .

Funcționînd la regim de reflux total, coloanei îi corespunde un număr minim de teler teoretice, care calculat cu ajutorul rel. (2.31) are valoarea  $N_{\min} = 7,21$ . Prin raportarea acestui număr la numărul de teler reale rezultă o eficiență medie  $E = 0,424$ .

S-au determinat prin măsurare suprafața efectivă a telerului  $S_t = 0,000365$  m<sup>2</sup> și înălțimea față de teler a deversorului  $h_D = 0,012$ .

Folosind ca date respectivele măriți anterior calculate sau măsurate, s-a urmărit utilizînd programul T52<sup>ca</sup> la stingerea regimului staționar, să se realizeze concordanța între valorile simulate și cele măsurate ale temperaturii în vîrf și plac.

În program eficiența telerului a fost considerată constantă și egală cu valoarea anterior determinată.

Pentru precizie, datorită erorii constructive decrete a

telerelor față de cea din model, s-a impus o variație liniară; s-a folosit în acest sens valoarea medie a pierderii de presiune pe un teler stabilită experimental  $\Delta p_j = (p_v - p_0) / 17$  renunțându-se deci la modul de calcul anterior expus, valabil pentru teler sită. S-au obținut valorile calculate  $T_D = 80,68^\circ\text{C}$ ,  $T_W = 102,96^\circ\text{C}$ , erorile relative față de cele măsurate experimental fiind de 0,22% și respectiv 0,04%.

O foarte bună concordanță s-a obținut și între valoarea măsurată a debitului de reflux ( $7 \cdot 10^{-7}$  kmol/s) și cea obținută prin simulare pentru regimul staționar ( $7,152 \cdot 10^{-7}$  kmol/s), respectiv o eroare de numai 2,17%.

Intr-o a doua etapă de experimentare s-a obținut rspunsul dinamic al instalației de laborator, ce va fi confruntat cu cel simulat în baza modelului elaborat; s-a folosit în acest scop un semnal treaptă de concentrație în blaz.

Realizarea respectivului semnal s-a efectuat prin introducerea rapidă în blazul coloanei, funcționând la regim staționar cu reflux total, a unei cantități de 1 mol de toluen încălzit la temperatura de  $111,5^\circ\text{C}$ . Introducerea toluenului la respective temperatură este justificată de menținerea în continuare în blaz a temperaturii de fierbere, corespunzătoare noii compoziții, și a fost stabilită prin rezolvarea ecuațiilor de bilanț de materiale și căldură corespunzătoare (folosind pentru aceste valori anterioare obținute pentru cantitățile  $n_{1W}$  și  $n_{2W}$ ) în urma respectivului semnal compoziția blazului devine  $X'_{1W} = 0,1804$ ;  $X'_{2W} = 0,8196$ , temperatura corespunzătoare de fierbere fiind  $T'_W = 103,6^\circ\text{C}$ .

S-au măsurat în continuare valorile temperaturilor din vîrf și blaz pînă la stingerea regimului staționar, păstrîndu-se nemodificat regimul de încălzire și cel de reflux total.

Respectivul semnal și răspunsul dinamic corespunzător a fost apoi simulat cu ajutorul programului T52.

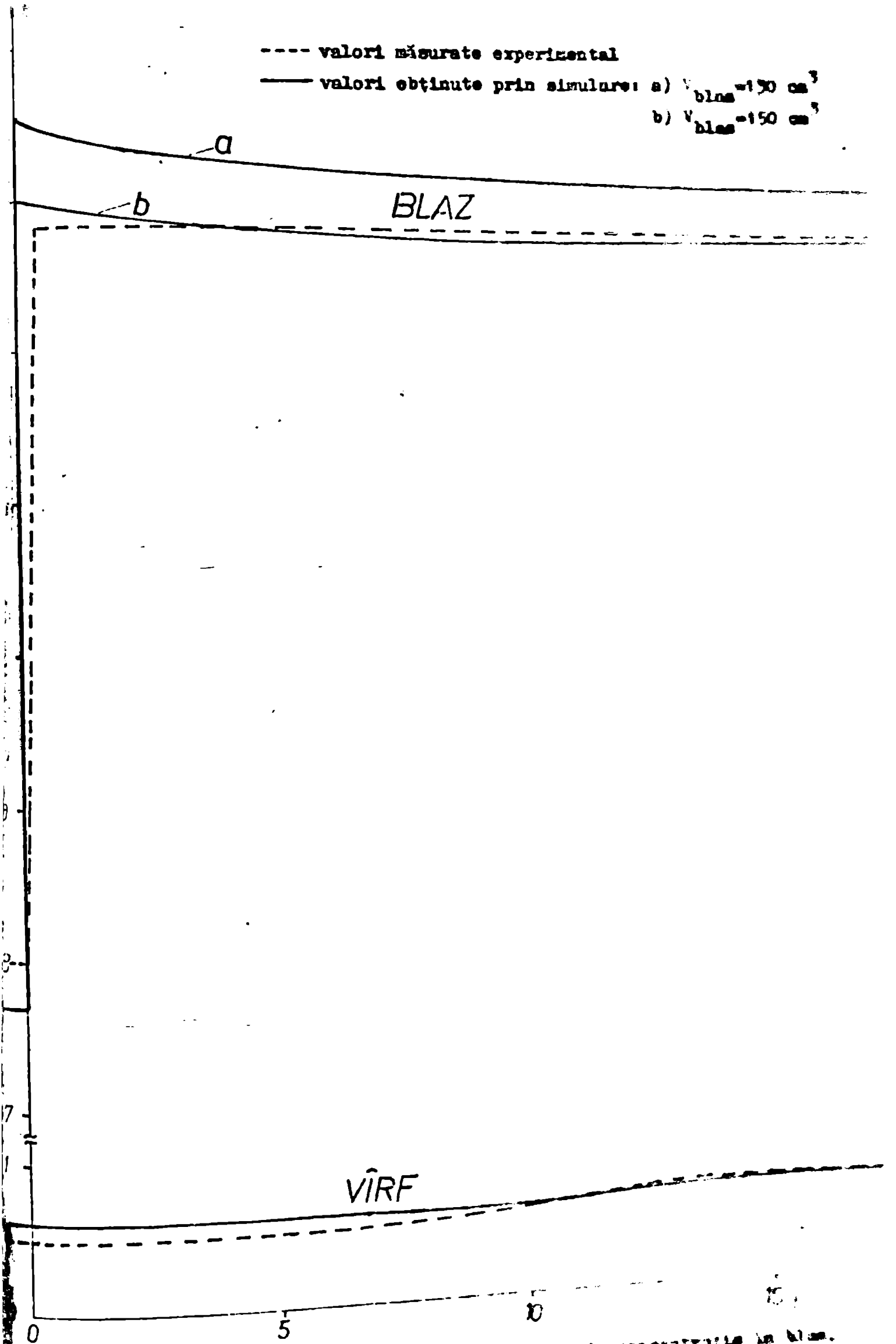


Fig. 3.14. Răspunsul dinamic pentru semnal treaptă de concentrație la blas.

În fig. 3.14 sînt reprezentate curbele de variație în timp a temperaturilor din vîrf și bază pentru valorile calculate și respectiv determinate experimental.

Variația temperaturii în vîrfurile coloanei este nesemnificativă (între 0,1 și 0,2 grade C) atât în varianta experimentală cît și în cea teoretică, faptul datorîndu-se numărului mare de țelere reale ale coloanei ce realizează practic o separare totală a componentului ușor.

Răspunsul dinamic simulat pentru temperatura bazului se suprapune practic peste cel măsurat experimental dacă se modifică viteza volumului de lichid din bază de la  $130 \text{ cm}^3$  (curba a) la  $150 \text{ cm}^3$  (curba b).

Eroarea între cele două valori este de 13%, însă măsurarea corectă a volumului unui lichid în fierbere este dificilă. Respectivă măsurare a fost îngreunată și de faptul că bazul conține într-un balon de  $250 \text{ cm}^3$ , diviziunile pentru  $130 \text{ cm}^3$  și  $150 \text{ cm}^3$  fiind în zona diametrului maxim, sînt la o distanță de cîtiva cm.

În totalitatea lor, confruntarea determinărilor experimentale cu rezultatele obținute prin simulare sînt o dovadă în plus a corectitudinii modelului elaborat.

#### 3.4. Aplicații ale modelului elaborat

Ca urmare a corectitudinii și a avantajelor anterior menționate, modelul de simulare a proceselor de rectificare elaborat în prezenta lucrare poate fi utilizat într-o largă varietate de aplicații. În lucrare acestea au fost orientate în următoarele două direcții, considerate prioritare datorită interesului practic pe care îl prezintă: stabilirea de relații pentru estimarea duratei regimului tranzitoriu la pornirea proceselor de rectificare și determinarea unei strategii pentru reducerea acestei perioade.

### 3.4.1. Stabilirea de relații pentru estimarea duratei regimului tranzitoriu la pornirea proceselor de rectificare

Importanța dispunerii de relații care să permită estimarea duratelor regimului tranzitoriu la pornirea proceselor de rectificare, apelând la mărimi ușor disponibile, este deosebit de importantă pentru programarea producției și evoluarea consumurilor. Menționăm că nu există informații cu privire la existența în literatura de specialitate a unei astfel de relații.

Din analiza răspunsului proceselor de rectificare la diferite semnale treaptă (cap. 3.3.2 și /36/) și intuitiv s-a presupus că durata regimului tranzitoriu depinde de următoarele mărimi:

- durata medie de staționare a lichidului în coloană  $\bar{\tau}_L$  calculată prin repartizarea sumei volumului  $\check{V}_T$  al tuturor celor  $N$  talere și al blazului  $\check{V}_B$  la debitul volumetric de lichid alimentat  $Q_{LP}$ :

$$\bar{\tau}_L = \frac{N \cdot \check{V}_T + \check{V}_B}{Q_{LP}} \quad (3.81)$$

- numărul total de talere reale  $N$
  - volumul telerului  $\check{V}_T$  calculat ca produsul dintre suprafața efectivă a telerului și înălțimea deversorului
- $$\check{V}_T = S_T \cdot h_{dev} \quad (3.82)$$
- volumul blazului (efectiv ocupat de lichid)  $\check{V}_B$
  - eficiența medie a telerelor coloanei  $E$  calculată ca raportul între numărul de talere teoretice corespunzătoare separării la regim staționar  $N_T$  și cel al telerelor reale  $N$ .

S-a notat cu  $\tau_s$  durata dimensională pentru atingerea regimului staționar, obținută prin raportarea respectivei valori dimensionale  $t_s$  la durata medie de staționare a lichidului în coloană:

$$\bar{\tau}_S = t_S / \bar{\tau}_L \quad (3.23)$$

și s-a propus următoarea relație de dependență a acestei mărimi în raport cu valorile lui  $N$ ,  $E$ ,  $\sqrt{V_T}$  și  $\sqrt{V_B}$ .

$$\bar{\tau}_S = \sigma_0 N^{\sigma_1} E^{\sigma_2} \sqrt{V_T}^{\sigma_3} \sqrt{V_B}^{\sigma_4} \quad (3.24)$$

Pentru stabilirea valorilor coeficienților  $\sigma_0 - \sigma_4$  s-a efectuat un experiment factorial ortogonal  $2^4$  ce a implicat 16 rulări ale programului T6. În aceste rulări, întrucât s-a urmărit stabilirea duratelor de staționare a regimului staționar pentru diferite combinații de valori ale variabilelor din experiment, s-a renunțat la tipărirea intermediară <sup>de rezultate</sup> între starea inițială și cea finală. Starea inițială a corespuns cu situația în care telerile coloanei sînt umplute pînă la înălțimea pragului deversor cu lichid avînd compoziția de alimentare și temperatură de fierbere, iar starea finală momentul în care valoarea medie a derivatelor în raport cu timpul devine mai mică de  $10^{-5}$ .

Modificarea valorii volumului teleralui, pentru a nu conduce la implicații de alte considerente, s-a făcut prin modificarea înălțimii pragului deversor, care în cadrul experimentului a fost la două nivele de variație și avut valorile 0,020 m și 0,030 m. Debitul volumetric al alimentării a fost constant în toate cele 16 situații  $Q_{LP} = 3,44 \cdot 10^{-2} \text{ m}^3/\text{min}$ , variația duratei medii de staționare  $\bar{\tau}_L$  obținîndu-se prin modificarea în cadrul experimentului a valorilor lui  $N$ ,  $\sqrt{V_T}$  și  $\sqrt{V_B}$ .

Compoziția de alimentare a fost constantă, iar condițiile de lucru au corespuns cu raport constant de reflux și flux calorice de încălzire a blazului deasemeni menționat. Valorile acestora sînt cele din varianta de referință expusă în cap. 3.3.1. Eficiența fiecărui teler a fost constantă și egală cu cea impusă pentru fiecare simulare în parte, și inițială în ecuația din program secțiunea prin care se efectuează calculul respectivei mărimi.

Cele 16 simulări corespunzătoare experimentului s-au efectuat pe minicalculatorul INDEPENDENT 100 și au necesitat o durată totală de calcul de aproximativ 130 ore (duratele au fost cuprinse între 4 ore pentru simularea nr. 14 și peste 13 ore pentru simularea nr. 3). Respectivsele durate de calcul trebuie să fie apreciate și prin prisma performanțelor reduse de viteză ale calculatorului utilizat; calculatorul de putere medie FELIX C 512 prezintă o viteză de circa 8 ori mai mare decât minicalculatorul INDEPENDENT 100 astfel că pe sistemul FELIX respectivul experiment ar fi durat în total circa 16 ore).

Tabelul 3.5

Nr. simu- lării	N	E	$V (m^3)$	$V_B (m^3)$	$\bar{T}_L (min)$	$t_0 (min)$	$\bar{T}_S$
1	15	1	0,00902	0,150	8,29	104,56	12,607
2	"	0,6	"	"	"	95,09	11,466
3	"	1	0,01353	"	10,26	125,78	12,259
4	"	0,6	"	"	"	108,97	10,621
5	"	1	0,00902	0,100	6,84	95,58	13,974
6	"	0,6	"	"	"	84,56	12,362
7	"	1	0,01353	"	8,81	115,69	13,137
8	"	0,6	"	"	"	98,08	11,137
9	10	1	0,00902	0,150	6,98	83,97	12,026
10	"	0,6	"	"	"	66,69	9,551
11	"	1	0,01353	"	8,29	96,84	11,677
12	"	0,6	"	"	"	72,22	8,708
13	"	1	0,00902	0,100	5,53	73,88	13,362
14	"	0,6	"	"	"	54,44	9,846
15	"	1	0,01353	"	6,84	86,88	12,702
16	"	0,6	"	"	"	60,44	8,836



Valorile factorilor și rezultatele experimentului sînt expuse în tabelul 3.5. În baza respectivelor valori după liniarizarea prin logaritmare a expresiei (3.84) un calcul simplu /52/ (datorită ortogonalității experimentului) permite obținerea valorilor constantelor  $\sigma_0 - \sigma_4$  conducînd la expresia :

$$\tau_S = \frac{1,9138 N^{0,3128} E^{0,4204}}{\sqrt{T}^{0,170} \sqrt{B}^{0,1632}} \quad (3.85)$$

Abaterile între valorile obținute în cadrul experimentului și cele date de relația (3.85) sînt indicate în tabelul 3.6 și fig. 3.15 a. Se observă că, întrucît abaterea relativă maximă este de 8,66% iar cea medie de 4,62%, relația (3.85) este deosebit de satisfăcătoare, justificînd selectarea variabilelor și forma dată respectivei dependențe.

Este deosebit de remarcabil modul în care estimează rel. (3.85) durata regimului tranzitoriu pentru simularea de referință din cap. 3.3.1. Astfel pentru același grad final de *stabilizare* (vezi cele ce urmează) în variante cu talere reale durata regimului tranzitoriu obținută prin simulare a fost de 86 minute, în timp ce valoarea estimată a acesteia în baza rel. (3.85) de 86,77 minute (eroare de 0,9%). Pentru coloane cu talere reale (eficiență reală de 0,7) respectivă durată obținută prin simulare este de 76 minute, în timp ce cea estimată este de 74,7 minute (eroare de -1,71%).

În cap. 4 se va arăta că relația (3.85) a dat rezultate foarte bune și pentru un alt ansamblu, precum și pentru valori diferite ale refluxului și ale fluxului termic din bloc. Faptul că în rel. (3.85) exponenții lui  $\sqrt{T}$  și  $\sqrt{B}$  sînt negativi nu înseamnă că creșterea respectivelor valori reduce durata stingerii regimului staționar. În acest sens trebuie să se revină la relația (3.83) de definire a lui  $\tau_S$  și corespunzător rel. (3.81) dacă s-ar efectua



respectivale substituții pentru celoulul timpului dimensional de intrare în regim staționar  $t_s$ , mărimile  $\sqrt{V_T}$  și  $\sqrt{V_B}$  se scriu ridicate la puteri pozitive.

Analog cu obținerea relației pentru estimarea refluxului optim (cap. 2.3), s-a căutat ca și în acest caz să se deducă o expresie mai ușor utilizabilă, în care să nu apară decât mărimi adimensionale.

Intrucât volumul telerului și cel al blazului apar în rel. (3.85) ridicate la puteri sensibile mai mici decât cele ale numărului de telere și eficienței telerului, iar exponenții acestora sînt apropiați de valorile  $1/3$  și respectiv  $1/2$  s-a propus relația :

$$\tau_s = c_0 N^{1/3} E^{1/2} \quad (3.86)$$

Linearizarea expresiei anterioare și aplicarea metodei celor mai mici pătrate a condus la obținerea valorii constantei  $c_0 = 5,6$ . Deci:

$$\tau_s = 5,6 N^{1/3} E^{1/2} \quad (3.87)$$

În tabelul 3.6 și fig. 3.15 b sînt prezentate curburile pe care le dă relația anterioară în raport cu valorile  $\tau_s$  obținute în cadrul experimentului factorial efectuat. Eroarea relativă medie de 6,04% a relației simplificată (3.87) nu este mult diferită de cea obținută prin aplicarea relației (3.85), permițînd de asemenea o foarte bună estimare a duratei regimului tranzitoriu la pornirea unui proces de rectificare.

Mădul de definire al condiției de staționaritate (valoarea medie a derivatelor în raport cu timpul mai mic ca  $10^{-5}$ ) este nepractic și criticabil întrucît se măsura cărini exprimate în unități de măsură diferite. În consecință, s-a căutat înlocuirea acestui criteriu cu unul cu o semnificație practică adecvată. În acest scop s-au tipărit pentru unul din experimente evoluția deri-

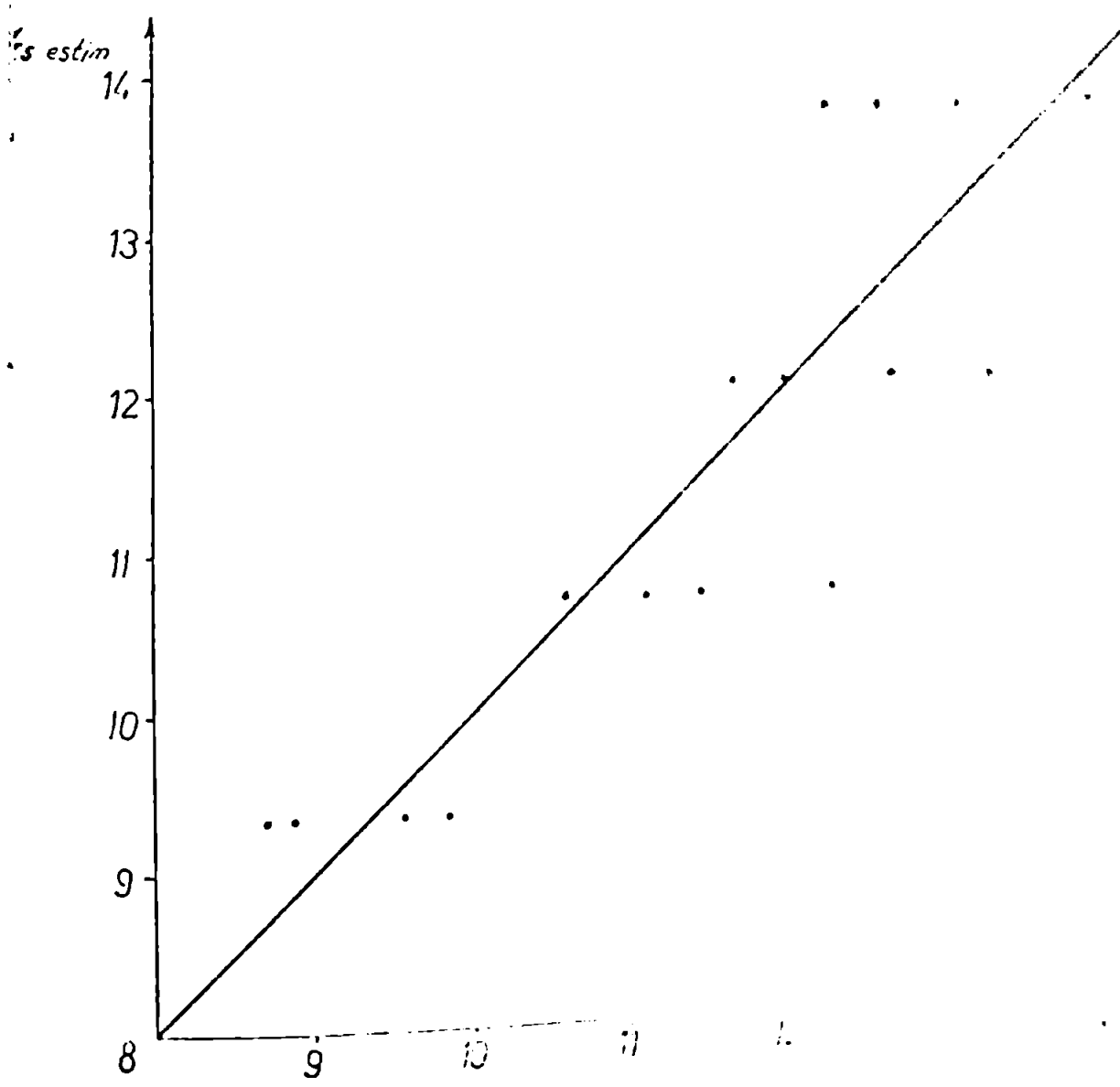
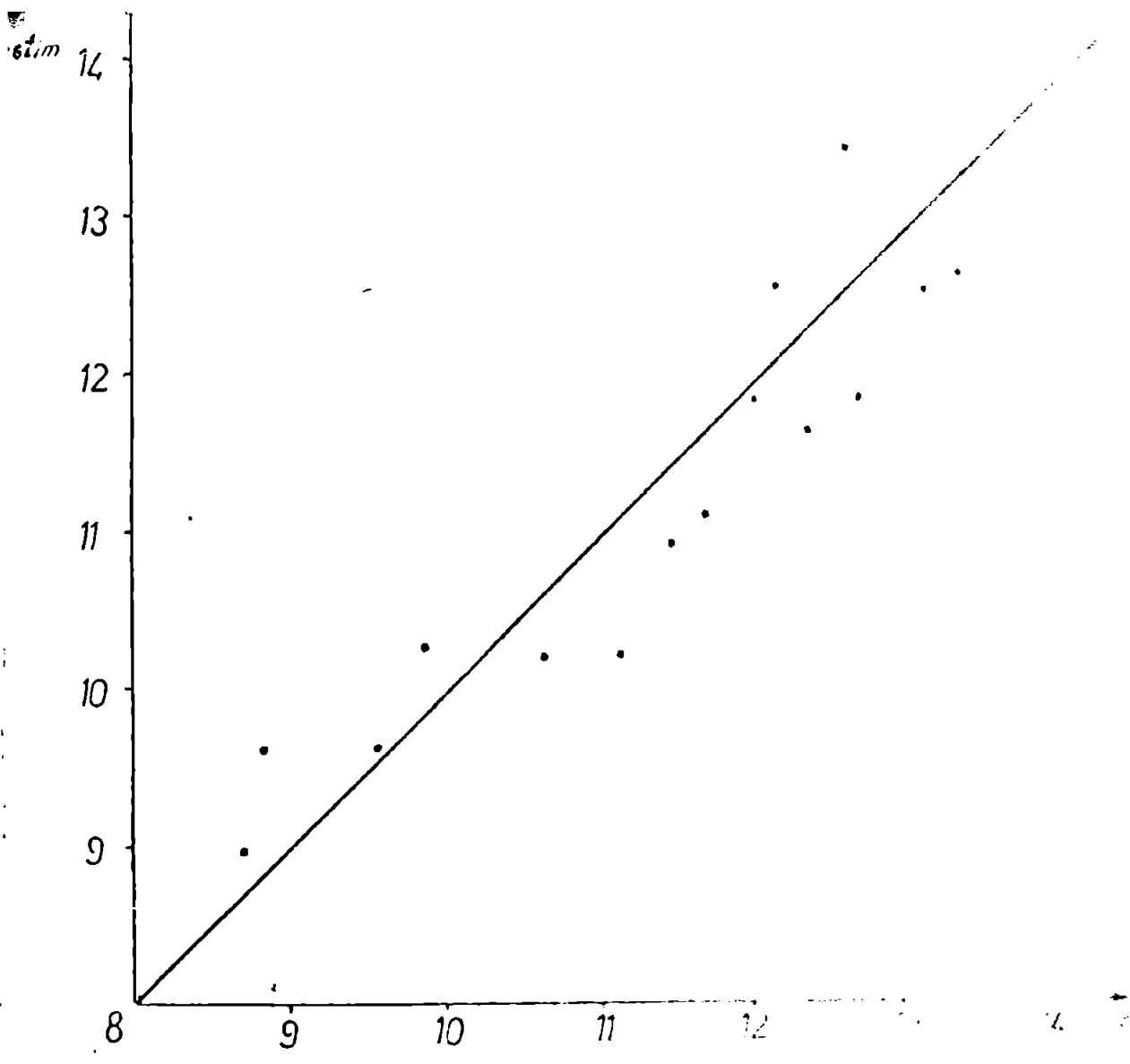


Fig. 14. Materialle det...

vatelor în timp (programul T 61). S-a constatat că derivatele temperaturii sînt de cîteva ordine de mărime mai mari ca celelalte derivate (ale fracțiilor molare și reținerilor molare de pe talere).

Tabelul 3,6

Nr. simulării	$\bar{t}_S$ din experiment	Relația (3,55)		Relația (3,67)	
		$\bar{t}_S$ calculat	Er %	$\bar{t}_S$ calculat	Er %
1	12,607	13,549	7,47	13,811	14,21
2	11,466	10,930	-4,67	10,69 <sup>a</sup>	-6,70
3	12,259	12,646	3,16	13,811	12,6 <sup>a</sup>
4	10,621	10,202	-3,94	10,69 <sup>a</sup>	0,72
5	13,974	14,476	3,59	13,811	-1,16
6	12,362	11,678	-5,54	10,69 <sup>a</sup>	-13,47
7	13,137	12,646	-3,73	13,811	5,13
8	11,137	10,202	-8,39	10,69 <sup>a</sup>	-3,94
9	12,026	11,935	-0,76	12,065	0,32
10	9,551	9,628	0,81	9,345	-2,15
11	11,677	11,140	-4,60	12,065	3,32
12	8,708	8,987	3,20	9,345	7,32
13	13,362	12,751	4,57	12,065	-9,71
14	9,846	10,297	4,48	9,345	-5,09
15	12,702	11,902	-6,30	12,065	-5,01
16	8,836	9,602	8,66	9,345	5,76
Eroarea relativă medie procentuală			4,62		6,04

În consecință criteriului de valoare limită a erorii tuturor derivatelor de  $10^{-5}$  îi corespunde valoarea limită a erorii derivatelor temperaturii de  $3,9 \cdot 10^{-5}$  grade C/A. Se ajunge la valoarea respectivă pe considerentul că, pentru un amestec de 3 componente, simularea coloanei cu 10 talere propusă în experimental

factorial conține 43 de ecuații diferențiale, din care 11 sînt cele corespunzătoare variațiilor de temperatură (pe cele 10 telere și în blaz), iar simularea coloanei cu 15 telere conține 63 de ecuații diferențiale, din care 16 pentru variațiile de temperatură. Neglijînd (cu excepția derivatelor temperaturii) participarea celorlalte derivate la valoarea medie acestora se obține valoarea de 3,9 atât din raportul 43/11 cît și din 63/16. În consecință se poate considera că starea staționară a fost definită ca fiind atinsă în momentul în care viteza variației temperaturii în timp medie pe întreaga coloană scade sub  $3,9 \cdot 10^{-5}$  grade C/s.

S-a urmărit de asemenea generalizarea relațiilor (3.85) și (3.87) pentru estimarea duratelor necesare atingerii unor stări intermediare celei total staționare caracterizate printr-un anumit grad de staționaritate al procesului. În acest scop se definește următorul grad de staționaritate al procesului  $\xi$  :

$$\xi = 1 - \frac{T - T_S}{T_0 - T_S} \quad (3.88)$$

unde  $T$  reprezintă temperatura medie în coloana corespunzătoare stării definite prin valoarea  $\xi$ , iar  $T_0$  și  $T_S$  valorile respectivei temperaturi în stările inițială și respectiv staționară. Se observă că pentru  $T = T_0$ ;  $\xi = 0$ , iar pentru  $T = T_S$ ;  $\xi = 1$ .

Se propune pentru raportul  $(T - T_S)/(T_0 - T_S)$  următoarea lege de variație în timp :

$$\frac{T - T_S}{T_0 - T_S} = e^{-kt/\bar{\tau}_L} \quad (3.89)$$

unde  $t$  este timpul curent,  $\bar{\tau}_L$  durata medie de staționare în coloana raportată la debitul de lichid elixentat (rel. 3.81), iar  $k$  are semnificația unei constante dinamice globale.

Prin derivarea relației (3.89) rezultă :

$$\frac{dT}{dt} = \frac{k}{\tau_L} (T_S - T_0) e^{-kt/\tau_L} \quad (3.90)$$

Se logaritmează expresia anterioară și se obține:

$$\ln \left( \frac{dT}{dt} \right) = \ln \left[ \frac{k}{\tau_L} (T_S - T_0) \right] - \frac{k}{\tau_L} t \quad (3.91)$$

Reprezentarea evoluției în timp a logaritmului celui de-al doilea derivatelor temperaturii trebuie să corespundă conform rel. (3.91) cu o dreaptă. S-a făcut reprezentarea grafică a respectivelor valori, obținute în cadrul simulării nr. 14 din experimentul factorial menționat (fig. 3.16). Se observă că cu mici excepții datorate erorilor de integrare numerică (care pot da abateri destul de mari în valorile momentane ale derivatelor) se obține respective variație liniară, verificându-se astfel ipoteza formulată prin ecuația (3.89).

S-a obținut prin regresie liniară pentru 15 perechi de valori  $\ln \left( \frac{dT}{dt} \right)$ ,  $t$  marcate cu punct plin în fig. 3.16 valoarea constantei  $k = 0,548$ . De remarcat că eroarea relativă medie procentuală a respectivei ecuații de regresie în raport cu datele utilizate este de numai 0,38%, respectivele puncte fiind toate practic perfect așezate pe o dreaptă. Relația (3.89) fiind verificată, se procedează în continuare astfel :

Combinând relațiile (3.88) și (3.89) se obține :

$$\xi = 1 - e^{-k\tilde{t}} \quad (3.92)$$

unde s-a notat cu  $\tilde{t}$  timpul dimensional  $t/\tau_L$ .

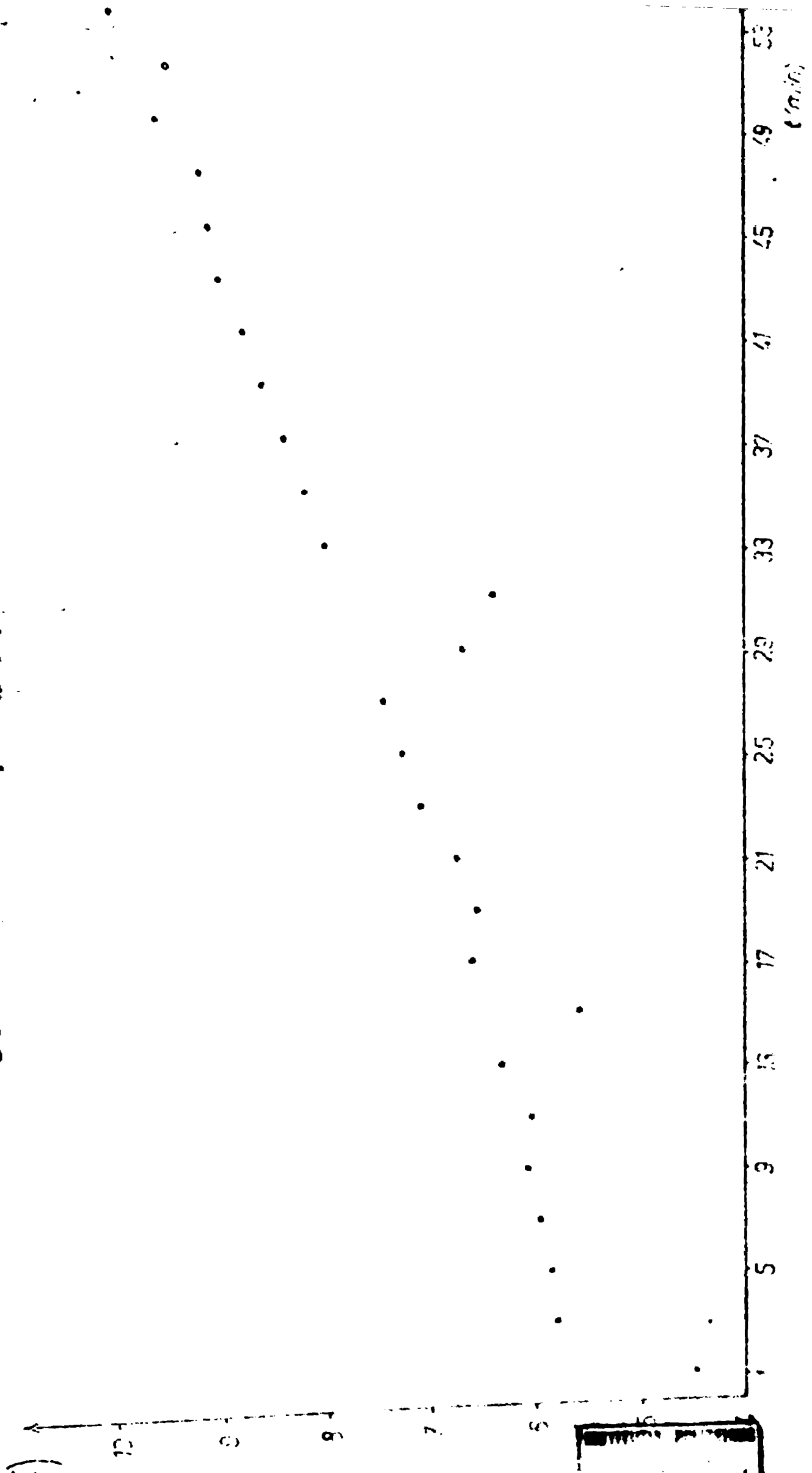
Înlocuind în expresia anterioară valoarea constantei  $k$  obținută prin regresie pentru simularea nr. 14 și respectiva valoare  $\tilde{t} = 9,846$  (tab. 3.5) se obține valoarea grăului de staționaritate atins la sfârșitul respectivului proces  $\xi = 0,9954$

Înlocuind această valoare și pe  $\tilde{t}$  conform cu rel. (3.87)

în relația (3.92) rezultă :

$$k = 0,963 N^{-1/3} E^{-1/2} \quad (3.93)$$

FIG. 3.16. *Antenna relative (3.91)*.



relație ce permite estimarea constantei dinamice globale a procesului. Substituind expresia anterioară în rel. (3.92) și notând cu  $\bar{t}_\xi$  durata (dimensională) necesară atingerii gradului de staționaritate  $\xi$  se obține:

$$\bar{t}_\xi = -1,04 N^{1/3} E^{1/2} \ln (1 - \xi) \quad (3.94)$$

Având în vedere aproximațiile făcute, precum eroarea relativă medie a relației (3.87), utilizate în obținerea expresiei anterioare și erorile introduse în evaluarea eficienței medii  $E$  se poate aproxima cu unitatea constantă 1,04 (eroare de -4%). Reordonând logaritmul pentru a elimina semnul minus din fața termenului drept rezultă în final expresia elegantă formată exclusiv din mărimi dimensionale:

$$\bar{t}_\xi = N^{1/3} E^{1/2} \ln \left( \frac{1}{1 - \xi} \right) \quad (3.95)$$

Astfel s-a obținut o generalizare a relației (3.87), ce permite deci determinarea duratei de atingere a unui anumit grad de staționaritate  $\xi$  în cadrul perioadei de regim tranzitoriu la pornirea unui proces de rectificare ce se desfășoară într-o coloană cu  $N$  talere reale având eficiența medie  $E$ .

Decă se înlocuiește în relația anterioară eficiența prin raportul  $N_T/N$  se obține expresia echivalentă corespunzătoare:

$$\bar{t}_\xi = \sqrt{\frac{N_T}{N^{1/3}}} \cdot \ln \left( \frac{1}{1 - \xi} \right) \quad (3.96)$$

După cum s-a menționat obținerea relațiilor prezentate în acest paragraf reprezintă lucrări absolut originale; în consecință sînt necesare pe viitor noi testări, atât prin simulare (cu consumul de timp de calcul corespunzător - motiv pentru care investițiile expuse s-au oprit la acest stadiu), cît și prin confruntarea cu date obținute din practica exploatareii instalațiilor industriale.

### 3.4.2. Determinarea unei strategii pentru reducerea duratei tranzitorii la pornirea proceselor de rectificare

Reducerea duratei regimului tranzitoriu la pornirea coloanelor de rectificare este o problemă de o importanță economică deosebită prin creșterea productivității întregului proces tehnologic ca urmare a stingerii într-un timp mai scurt a valorilor prescrise de funcționare, precum și prin reducerea corespunzătoare a respectivelor consumuri energetice.

Minimizarea duratei regimului tranzitoriu cu ajutorul unei sau mai multor variabile de control este o problemă de determinare de politică optimă, în principiu abordabilă prin una din metodele adecvate cum ar fi calculul variațional, principiul maximei sau tehnicile numerice de tipul Rayleigh-Ritz /25/. Datorită numărului mare de "restricții locale" (ce corespund cu ecuațiile diferențiale din cadrul modelului prezentat), duratele de execuție ale respectivelor programe sînt uriașe, chiar și utilizînd calculatoare mai performante decît cel folosit pentru elaborarea acestei lucrări. În acest sens menționăm că pînă în prezent s-au rezolvat probleme de politici optime în care apar doar cîteva restricții locale (pînă la cea la restricții locale).

În aceste condiții, s-a cautat să se determine o strategie de reducere a duratei regimului tranzitoriu la pornirea proceselor de rectificare fără a i se impune acestor cerințe de optim.

Premiza care a condus la strategia propusă în cele ce urmează a constat dintr-un fapt, unanim cunoscut din practica exploatarea proceselor de rectificare (verificat așa cum se va vedea și prin simulare în cadrul acestei lucrări) și anume acela că durata de stingere a regimului staționar la pornire pentru o coloană funcționînd la reflux total, fără alimentări și evacuari, este mult mai redusă decît pentru funcționarea ei obișnuită la un raport de reflux finit. Această observație nu intră în contradicție



cu conținutul paragrafului precedent în care durata de staționare era independentă de raportul de reflux, întrucât se considera operarea la rapoarte de reflux finite. Funcționarea la reflux total, fără alimentări și evacuari, este privită în mod uzual ca un caz teoretic. Totuși, în lucrarea de față s-a căutat să se folosească în mod corespunzător respective staționare rapidă. În acest sens se propune următorul mod de operare:

1 - Se încarcă talerele și blazul coloanei cu un așa-nunat "amestec de pornire" a cărui compoziție este egală cu cea a amestecului care s-ar obține din zestrea talerelor și a blazului pentru funcționarea la regimul staționar urmărit. Astfel, numărul total de kmoli de component  $j$  din coloana funcționării în regimul staționar final urmărit este:

$$N_{tj} = \sum_{i=1}^m x_{ij} N_j + x_{iW} N_B \quad j=1 \dots n \quad (3.97)$$

unde  $N_B$  este reținerea molară a blazului; corespunzător se pot calcula concentrațiile celor  $n$  componente.

2 - Se pornește coloana de reflux total, fără alimentări și evacuari, încălzirea blazului fiind constantă și egală cu cea calculată pentru regimul staționar final. (În acest caz nu sînt necesare adaptări constructive speciale pentru strategia propusă).

3 - În momentul în care temperaturile din vârful și blazul coloanei ajung la valori apropiate de cele corespunzătoare regimului staționar se deservi debitele de alimentare și evacuare, iar raportul de reflux se modifică la cel corespunzător regimului staționar final.

S-a confruntat prin simulare strategia anterior propusă cu cea uzual practică industrială, corespunzătoare variației de referință din cap. 3.3.1. Confruntarea s-a făcut pentru

cazul coloanei prevăzute cu talere reale. Compoziția amestecului de pornire calculată în modul anterior expus este pentru cazul investigat :

$$X_1 = 0,2077 \quad X_2 = 0,6087 \quad X_3 = 0,1836$$

Simulând funcționarea la reflux total, fără alimentări și evacuări (programul T 41), s-a obținut că după 2,5 minute temperaturile în vîrf și la bază ajung la valori apropiate de cele corespunzătoare regimului staționar final. Din acest moment s-a simulat funcționarea în continuare a coloanei la raportul de reflux constant prestabilit ( $R = 3$ ) și evacuările corespunzătoare de dietilat și reziduu (programul T 4).

Se ajunge la regim staționar (media derivatelor temperaturi sub  $3,9 \cdot 10^{-5}$  grad C/s) într-un interval total de timp de 35,5 s. Întrucît în varianta de operare uzuală, simulată în cap. 3.3.1, durata regimului tranzitoriu la pornire a fost de 76 s, rezultă că prin strategia de operare propusă s-a obținut o reducere la 47% a respectivului interval. În fig. 3.17 este prezentată evoluția temperaturii în timp pentru blazul, vîrf și talerul de alimentare al coloanei în cazul strategiei propuse și al operării de referință.

Linia punctată reprezintă modul în care ar fi evoluat temperatura dacă se continua operarea la reflux total, observîndu-se că s-ar fi atins condițiile staționare în numai 9 minute.

Desigur că rezultatele obținute, fiind doar pentru un singur caz, nu pot fi momentan generalizate. Este de așteptat ca aplicînd strategia propusă să se obțină oricîr reduceri ale duratei regimului tranzitoriu, în funcție de cazuri diferite, de la caz la caz. Ce și pentru lucrările expuse în paragraful precedent și aici sînt necesare pe viitor cercetări suplimentare, atât pe bază de simulare, cît și experimentale în laborator și în instalații industriale.

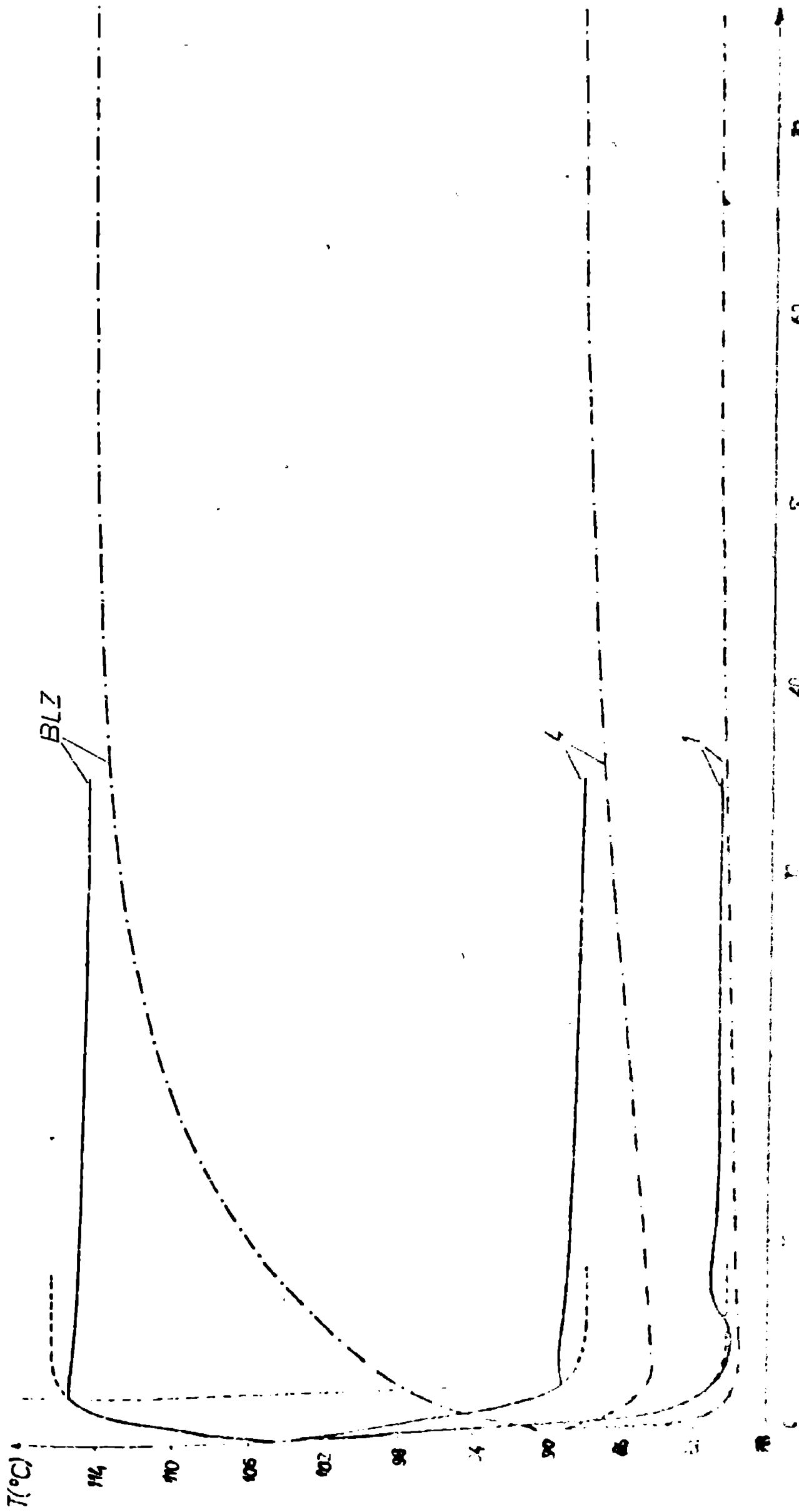


Fig.3.17. Reducerea duratei de regie tranzitoriu folosind strategia "reflux total" (curba cu puncte) cu viziunea uzuală de operare (—).  
 40 50 60 70 80

Trebuie reținut faptul că strategia propusă nu implică pentru aplicare modificări ale instalației sau alte categorii de cheltuieli; cel mult este necesar un vas pentru amestecare în scopul preparării "amestecului de pornire". Obținerea acestuia nu ridică probleme, oricând după pornirea inițială a instalației existând ingredientele necesare în acest scop. Pentru stabilirea concentrațiilor componentelor din respectivul amestec se poate folosi modelul elaborat în prezenta lucrare care permite determinarea concentrațiilor și reținerilor molare de pe talere în regim staționar.

#### 4. Analiza prin simulare dinamică a sistemelor de coloane de rectificare interconectate

Prezentul capitol urmărește exemplificarea modului de analiză, folosind modele complexe, a sistemelor cu elemente dimensionate pe baza unor metode rapide, simplificate. În conformitate cu conținutul capitolelor anterioare, un sistem de coloane de rectificare interconectate, pentru fracționarea unui amestec multi component, va fi dimensionat utilizând modele simplificate de tipul celor expuse în cap. 2, ce permit obținerea unor soluții cu efort redus de calcul; respective proiectare simplificată va fi analizată cu ajutorul modelului complex de simulare dinamică elaborat în cap. 3. Aceasta permite atât verificarea soluțiilor de proiectare propuse pentru regimul staționar, cât și studiul comportării în regim dinamic a fiecărui element în parte, precum și a întregului sistem.

##### 4.1. Analiza prin simulare dinamică a dimensionării coloanelor de rectificare

Dimensionarea coloanelor de rectificare pentru separarea unui amestec multicomponent necesită stabilirea numărului de teler, a diametrului coloanei, precum și stabilirea unor caracteristici proprii tipului și de teler propus.

Stabilirea diametrului coloanei, a tipului și caracteristicilor constructive ale telerului sînt de regulă probleme de hidrodinamică ce preced stabilirea numărului de telere și care nu vor intra în discuție în cele ce urmează. Determinarea numărului de telere este problema esențială pentru calculul coloanelor de rectificare a amestecurilor multicomponente. Acestea se rezolvă uzual prin raportarea numărului de telere teoretice la o valoare a eficienței medii a telerului, estimată prin relații de calcul sau stabilită experimental. Stabilirea numărului de

telere teoretice este posibilă fie pe baza metodelor rapide ca Gilliland, Fenske-Underwood-Erbarr-Maddox, Smith-Brinkley sau exacte ca: Lewis-Matheson, Thiele-Geddes, Bonner, Amunson-Pontien /28/.

În principiu (deși rar utilizată datorită volumului mare de calcul) este posibilă și în cazul amestecurilor multicomponente determinarea numărului de talere reale pe baza cineticii transferului de masă.

Trebuie reținut faptul că rezultatele obținute în baza așa-numitelor metode exacte sînt dependente de corectitudinea valorii folosite pentru eficiența medie a telerului. Deoarece metodele rapide, ca cea a lui Gilliland, sau cea a lui Fenske-Underwood-Erbarr-Maddox dau în raport cu metodele exacte erori mici (7% și respectiv sub 5%), iar estimarea sau determinarea eficienței medii nu este posibilă cu o precizie mai mare, este explicabilă utilizarea frecventă a metodelor rapide.

În consecință și în cele ce urmează s-a utilizat predimensionarea rapidă a coloanelor cu ajutorul metodei Gilliland, folosită de altfel și în cadrul capitolului 2. Elementul nou constă însă în verificarea respectivei dimensionări cu ajutorul modelului elaborat în cadrul cap. 3, a cărui corectitudine a fost testată în mod corespunzător. Această procedură ilustrează posibilitatea utilizării unui așa numit "model de simulare" în accepțiunea restrînsă a cuvîntului simulare (vezi cap. 1) la verificarea corectitudinii unei anumite soluții de dimensionare. Pe lângă aceasta, datorită corectitudinii de model dinamic se pot investiga suplimentar o serie de aspecte, ca de exemplu durata regimurilor transiției în corelare cu respectiva dimensionare.

### Aplicație numerică

Procedura propusă este exemplificată după cum urmează:  
S-a propus separarea amestecului de 4 componente folosit pentru exemplificări și în cadrul capitolului anterior (benzen(1)-toluen (2)-etil-benzen (3)-o-xilen (4)) în următoarele condiții:

- debitul amestecului original : 0,01 Kmoli/s
- concentrațiile în amestecul original ale celor 4 componente:

$$X_{1F} = X_{2F} = X_{3F} = X_{4F} = 0,25$$

- presiunile în blazurile coloanelor de separare sînt egale cu presiunea atmosferică.
- concentrațiile finale impuse:

$$X_1 \geq 0,9; \quad X_2 \geq 0,85 \text{ și } X_4 \geq 0,9$$

Pentru secvența separărilor s-a folosit schema nr. 3 din fig. 2.1f, care a fost găsită ca fiind cea optimă în cazul în care în amestecul original componentii sînt în proporții echimolare. În această ordine de idei trebuie explicat faptul că nu s-a abordat în cele ce urmează verificarea soluției optime obținute în cap. 2.6 (tab. 2.6) datorită valorii ridicate a numărului total de țelere din cele 3 coloane (respectiv 192), corespunzător cu gradele de separare foarte înaintate ale celor 4 componente.

Tot în scopul reducerii dimensionalității problemei, respectiv a numărului total de țelere, în cazul fracționării amestecului componentilor 3 și 4 nu s-a urmărit decât puritatea componentului greu, așa cum se observă și din datele propuse.

Verificarea dimensionării fiecărei coloane în parte este posibilă (atît pentru soluția optimă propusă în cap. 2, cît și pentru cazul în care se impune o anumită puritate și pentru componentul 3), dar nu și simularea dinamică a întregului sis-

tem, ce va fi efectuată în paragraful următor.

Această imposibilitate nu este de principiu, ci datorată capacității memoriei și vitezei reduse a calculatorului utilizat. (INDEPENDENT 100). Tot în acest sens, pentru a reduce numărul total de ecuații diferențiale ale sistemului, nu s-au folosit în dimensionare rapoartele de reflux optime date de relațiile din cap. 2.3, ci valori mai mari ale acestora care conduc la un număr mai mic de talere. Chiar și în aceste condiții, așa cum se va expune în continuare, simularea dinamică a întregului sistem a necesitat integrarea numerică simultană a 197 de ecuații diferențiale, fiind la limite posibilităților de viteză ale calculatorului utilizat.

Pentru dimensionarea cu ajutorul metodelor rapide a coloanelor din sistem, concentrațiile din vârful și blazul coloanelor pentru componentii cheie au fost impuse ca date, în timp ce pentru ceilalți componente s-au estimat respectivele valori prin proporționalitate cu volatilitățile lor relative /5%. Pentru localizarea telerului de alimentare s-a utilizat condiția/28/:

$$\left(\frac{x_u}{x_g}\right)_{jP} = \frac{x_{u,P} + (q-1) x_{u,D}/(R+1)}{x_{g,P} + (q-1) x_{g,D}/(R+1)} \quad (4.1)$$

unde indicii u și g denotă componentii cheie ușor și respectiv greu, P - alimentarea, D - distilatul iar jP numărul telerului de alimentare; q - reprezintă starea termică a alimentării definită prin rel. (3.77).

S-au considerat talere sită cu deversoare ploșă. Suprafața telerelor s-a calculat în mod expus în capitoul anterior, prin scăderea din aria secțiunii libere a suprafețele deversoarelor (rel. 3.61-3.62). Suprafața totală a orificiilor se calculează ca o fracție  $\phi$  (rel. 3.48) din suprafața telerului  $S_t$ :

$$S_{t,or} = \phi S_t \quad (4.2)$$



Dimensionarea cu ajutorul metodelor rapide a celor trei coloane din sistem este expusă în tabelul 4.1. Coloana de rectificare nr. 1 corespunde separării azeotropului original, componenții cheie fiind (2) și respectiv (3); în coloana de rectificare nr. 2 se fracționează în continuare distilatul ce vine de la coloana 1, în timp ce coloana numerotată cu 3 fracționează reziduul coloanei 1.

Alimentările coloanelor se fac cu lichid saturat la temperatura de fierbere. Debitul și compoziția alimentării coloanei este corespunzătoare datelor problemei propuse. Pentru compozițiile și debitele alimentărilor coloanelor 2 și 3 cu efluenții coloanei 1 s-au folosit valorile obținute în urma simulării coloanei 1 (vezi tab. 4.2).

Verificarea acestor dimensionări pe bază de metode rapide s-a făcut cu ajutorul modelului de simulare dinamică elaborat în cap. 3 în modul următor: s-a simulat intrarea independentă în regim staționar a celor trei coloane având parametrii construcțivi și funcționali corespunzători tabelului 4.1. S-au comparat debitele și concentrațiile efluenților coloanelor la regim staționar obținute prin simulare cu respectivele valori care au stat la baza calculului de dimensionare (tab. 4.2).

Simulările au fost făcute cu programul T7, o variantă a programului T4, mai generală din punctul de vedere al formei de introducere a datelor.

Din analiza valorilor expuse în tabelul 4.2 rezultă că dimensionarea celor trei coloane folosind relații de calcul rapid este satisfăcătoare; separările realizate sînt apropiate de cele care au stat la baza respectivelor dimensionări. De asemenea, se îndeplinesc condițiile impuse asupra valorilor concentrațiilor finale prin datele problemei exemplificative ( $X_1 = 0,9073 > 0,9$ ,  $X_2 = 0,8525 > 0,85$  și  $X_4 = 0,9329 > 0,9$ ).

Tabelul 4.1

Mărimea fizică	Unit. măsură	Coloana 1	Coloana 2	Coloana 3	Metoda de calcul
Temperatura distilatului, $T_D$	$^{\circ}\text{C}$	91,5	80	134	Rel.(3.11)
Temperatura rezidului, $T_W$	$^{\circ}\text{C}$	138,2	112,8	143	Rel.(3.11)
Temperatura medie, $T_m$	$^{\circ}\text{C}$	114,85	96,4	139,5	$T_m = (T_D + T_W) / 2$
Volatilitatea relativă medie pentru componentii cheie $\alpha$	-	2,077	2,47	1,245	Rel.(3.10) și $\alpha = P_u / P_g$
Numărul minim de telerete teoretice, $N_{\min}$	-	5	7,04	11,28	Rel.(2.31)
Raportul minim de reflux, $R_{\min}$	-	1,285	0,868	0,566	Rel.(2.32)
Raportul de reflux, $R$	-	82	11	12,5	Propus
Numărul de telerete teoretice, $N_T$	-	5,79	7,57	11,78	Rel.(2.12)-(2.15)
Eficiența medie a teleretelor, $E$	-	0,7	0,69	0,655	Rel.(2.35)
Numărul de telerete reale $N$	-	8	11	18	Rel.(2.11)
Teleretul de alimentare	-	5	6	2	Rel.(4.1)
Viteza fictivă a vaporilor $W$	m/s	0,76	0,76	0,76	Rel.(2.35)
Debitul volumetric mediu al vaporilor $Q_v$	$\text{m}^3/\text{s}$	1,463	1,018	1,954	Rel.(2.17)
Diametrul interior al coloanei $d_0$	m	1,6	1,7	1,8	Rel.(2.16) și rotunjit SFAE
Lungimea deversoarelor $l_{dev}$	m	0,96	1,02	1,08	$l_{dev} = 0,6 d_0$
Înălțimea pragului deversor $h_{dev}$	m	0,02	0,02	0,02	Propus constructiv
Suprafața telerului $S_t$	$\text{m}^2$	1,801	2,033	2,279	Rel.(3.61),(3.62)
Suprafața totală a orificiilor telerului $S_{t,or}$	$\text{m}^2$	0,180	0,203	0,229	Rel.(3.49),(4.2)

Continuare tabelul 4.1

Mărimea fizică	Unit. măsură	Coloana 1	Coloana 2	Coloana 3	Notă de calcul
fluxul termic de încălzire a blasului	W	1516620	1018260	1993910	Rel. (3.76)
Volumul ocupat de lichidul din blas $V_B$	m <sup>3</sup>	0,150	0,150	0,150	Progr. constructiv
Volumul telerului $V_T$	m <sup>3</sup>	0,036	0,041	0,046	Rel. (3.82)
Debitul volumetric de lichid de slăntare $Q_{Lp}$	m <sup>3</sup> /s	$1,239 \cdot 10^{-3}$	$0,552 \cdot 10^{-3}$	$0,693 \cdot 10^{-3}$	$Q_{Lp} = Q_T \bar{V}_T / \bar{\rho}_T$
Durata medie de staționare a lichidului în coloană $\bar{t}_L$	min	5,89	18,03	23,34	Rel. (3.81)

Tabelul 4.2

Mărimea fizică	Coloana 1		Coloana 2		Coloana 3	
	staționare	simulare	staționare	simulare	staționare	simulare
Debit de lichid (l/s)	$5 \cdot 10^{-3}$	$5,03 \cdot 10^{-3}$	$2,725 \cdot 10^{-3}$	$2,742 \cdot 10^{-3}$	$4,110 \cdot 10^{-3}$	$4,142 \cdot 10^{-3}$
poziție lichid:						
$x_{1D}$	0,50	0,4968	0,900	0,9073	0	0,0006
$x_{2D}$	0,45	0,4386	0,095	0,0925	0,0738	0,0739
$x_{3D}$	0,05	0,0487	0,005	0,0002	0,5262	0,5326
$x_{4D}$	0	0,0159	0	0	0,4	0,3929
Debit de lichid W (l/s)	$5 \cdot 10^{-3}$	$4,97 \cdot 10^{-3}$	$2,275 \cdot 10^{-3}$	$2,261 \cdot 10^{-3}$	$0,854 \cdot 10^{-3}$	$0,850 \cdot 10^{-3}$
poziție lichid:						
$x_{1W}$	0	0,0005	0,0138	0,0049	0	0
$x_{2W}$	0,05	0,0612	0,8500	0,8525	0	0
$x_{3W}$	0,45	0,4523	0,1010	0,1075	0,1	0,0672
$x_{4W}$	0,50	0,4860	0,0352	0,0351	0,9	0,9328

În caz că s-ar fi obținut anumite neconcordanțe mai importante era necesar a se efectua și în dimensionările respective corecțiile de rigoare, urmate apoi de verificarea respectivă prin simulare. (de exemplu dacă nu se atinge gradul de separare dorit pentru un anumit component, se majorează corespunzător numărul de talere, recalculându-se eficiența și eventual numărul de talere teoretice).

În general este de așteptat ca în maximum 2-3 iterații implicând dimensionări și simulări succesive să se obțină soluția corectă dorită.

Simularea dinamică a celor trei coloane s-a făcut pentru perioada de pornire, stările inițiale și finale fiind identice cu cele din capitolul anterior: starea inițială corespunde momentului pornirii procesului de rectificare cu talerele încărcate cu lichid având compoziția amestecului de alimentare și aflat la temperatura de fierbere, iar starea finală momentului în care valoarea medie a derivatelor temperaturii este mai mică de  $3,9 \cdot 10^{-5}$  grade C/s. (la coloana 3 datorită duratei mari de calcul s-a oprit execuția programului la valoarea medie a derivatelor temperaturii de  $1,67 \cdot 10^{-4}$  grade C/s).

Respectivele simulări au permis o verificare suplimentară a posibilităților de estimare a duratei regimului tranzitoriu expuse în cap. 3.4.1. Astfel, pentru coloana 1 conform rel. (3.85) durata pentru stingerea regimului staționar definit așa cum s-a mai menționat prin  $\partial T / \partial t < 3,9 \cdot 10^{-5}$  se estimează la 44,59 min; în urma simulării s-a găsit că valoarea exactă a acestei durate este de 50,25 minute, eroarea relativă a estimării fiind de -11,25%. Pentru coloana 2 concordanța între respectivele valori este și mai bună; durata estimată 146,61 min, durata exactă 143,90 min, eroarea relativă 1,88%.

Pentru coloana 3 confruntarea nu a fost posibilă intrucît execuția programului a fost oprită înainte atingerii condițiilor anterior definite de staționaritate, din cauza duratei excesive de calcul.

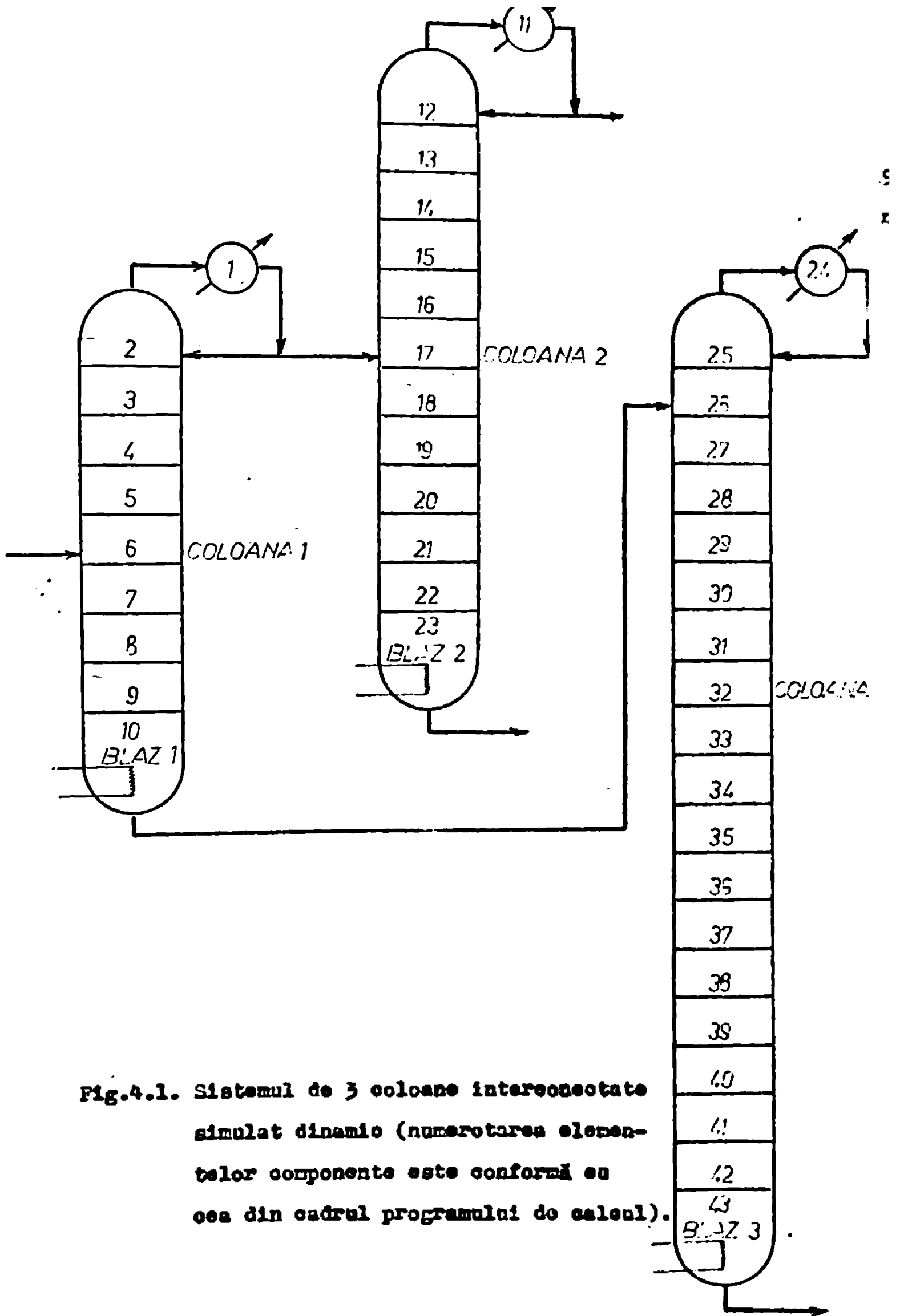
De remarcă că, față de condițiile experimentului, există o serie de date modificate ce numărul de componente al amestecului fracționat, concentrațiile lor în alimentare, rapoartele de reflux. Intrucît corelările obținute sînt bune, se verifică ipoteza făcută anterior că aceste mărimi nu influențază durata respectivelor regimuri tranzitorii.

#### 4.2. Simularea dinamică a sistemelor de coloane la rectificare interconectate

În cele ce urmează se prezintă posibilitatea extinderii utilizării modelului elaborat în cap. 3 la simularea funcționării în regim dinamic a unui sistem de coloane la rectificare interconectate.

În acest scop s-a introdus un semnal treaptă pe debitul de alimentare al primei coloane în ordinea secvenței de separare și s-a studiat răspunsul dinamic al întregului sistem. Aplicația s-a făcut pentru sistemul din paragraful precedent reprezentat schematic în fig. 4.1. Simularea s-a făcut cu ajutorul programului T71 (vezi anexa) care conține alături de modulele prezentate în cap. 3.3 subrutina SCHEX ce definește legăturile dintre elementele sistemului. Înainte introducerii semnalului sistemul funcționează în condițiile staționare obținute în paragraful precedent. Semnalul introdus a constat în majorarea debitului de alimentare al coloanei 1 cu 20% respectiv de la valoarea 0,01 kmol/s la 0,012 kmol/s, toate celelalte condiții de operare menținându-se nemodificate.

Simularea respectivului răspuns a necesitat integrarea



**Fig.4.1. Sistemul de 3 coloane interconectate simulat dinamic (numarotarea elementelor componente este conformă cu cea din cadrul programului de calcul).**

unui sistem de 197 ecuații diferențiale: cîte 5 ecuații (3 de bilanț parțial, una de bilanț global și una pentru calculul temperaturii) pentru fiecare din totalul celor 37 de țelere componente ale coloanelor și cîte 4 ecuații (trei de bilanț total, și una pentru calculul temperaturii, bilanțul global rezultînd din impunerea condiției de volum constant) pentru cele trei blazuri. Complexitatea și volumul calculelor este ilustrat numai deocînd se arată că în fiecare moment al integrării numerice a fost necesară evaluarea a  $37 \times 4 \times 2 = 296$  coeficienți parțiali de transfer de masă, fiecare din acestea necesitînd calculul a cîte 6 valori distincte pentru coeficienții de difuzie în fază gazoasă și cîte 12 valori pentru cei în fază lichidă, precum și evaluarea a altor proprietăți fizice pentru fiecare fază (viscozitate, densitate).

În consecință realizarea simulării răspunsului dinamic al sistemului la semnal pe o perioadă de 70 min a necesitat pe calculatorul INDEPENDENT loc o durată de calcul de 20 de ore.

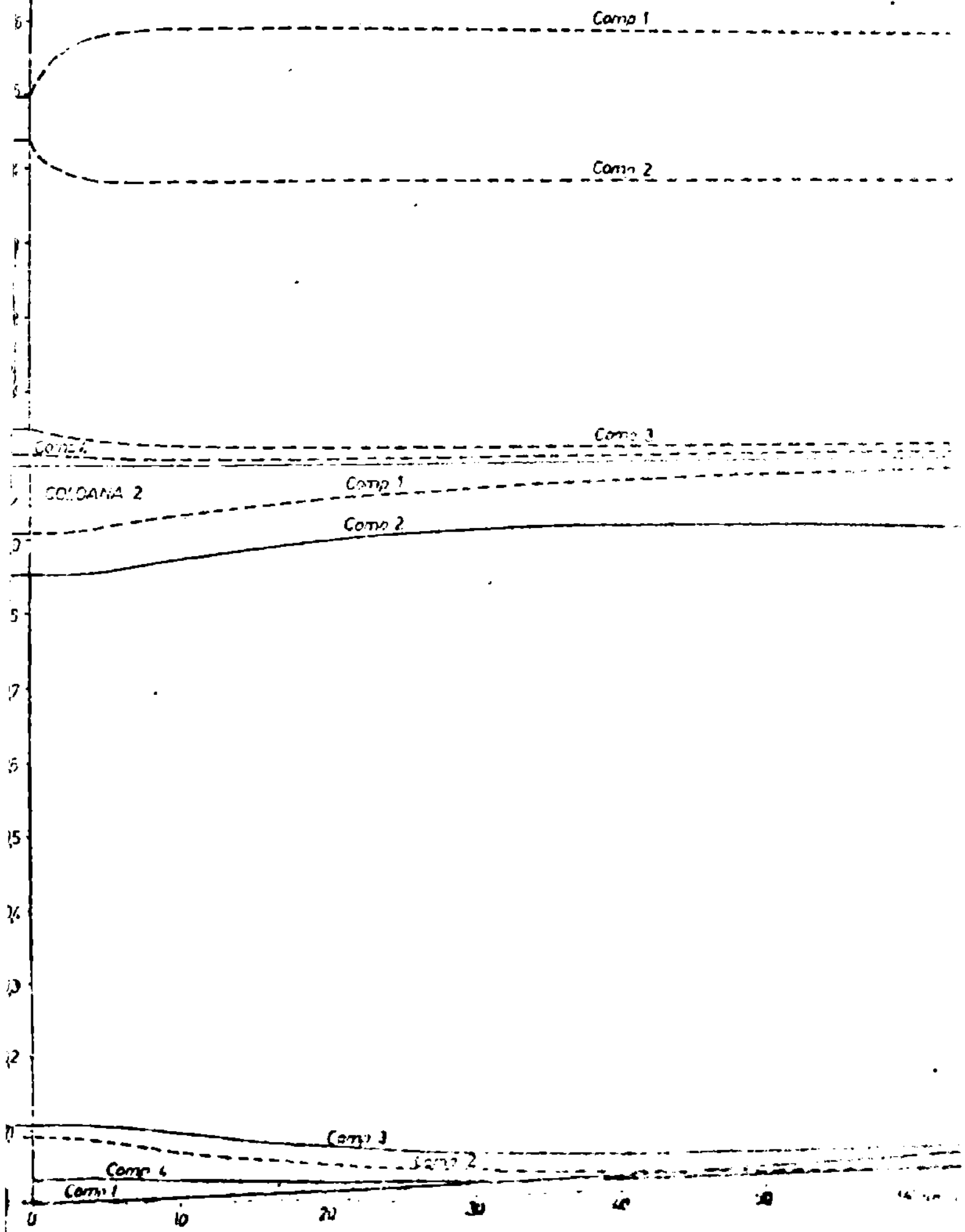
Simularea nu a ținut cont de întârzierile pe care le introduc conexiunile dintre coloane, al căror efect va consta în translația corespunzătoare a curbelor de răspuns pentru coloanele 2 și 3.

În fig. 4.2 și 4.3 sînt reprezentate răspunsurile în concentrațiile efluenților celor trei coloane. Conform modifizării bilanțului termic al coloanei 1 (vezi și cap. 3.3.2) prin creșterea debitului de alimentare se majorează concentrația componentului 1 în distilat în detrimentul celorlalți componente. Pentru reziduu/acestei coloane se constată de asemenea creșterea concentrației componentului cel mai volatil, respectiv componentul 2 (componentul 1 fiind prezent într-o proporție nesemnificativă) și scăderea corespunzătoare a concentrației celorlalți

COLONANA 1

Fig.4.2. Răspunsul dinamic al coloanelor 1 și 2 la creșterea cu 10% a debitului de alimenta.

- - - concentrații în distilat  
— concentrații în reziduu





COLOANA 1

Fig.4.3. Răspunsul dinamic al coloanelor 1 și 3 la creșterea cu 10 % a debitului de alimentare.

- - - concentrații în distilat  
— concentrații în reziduu

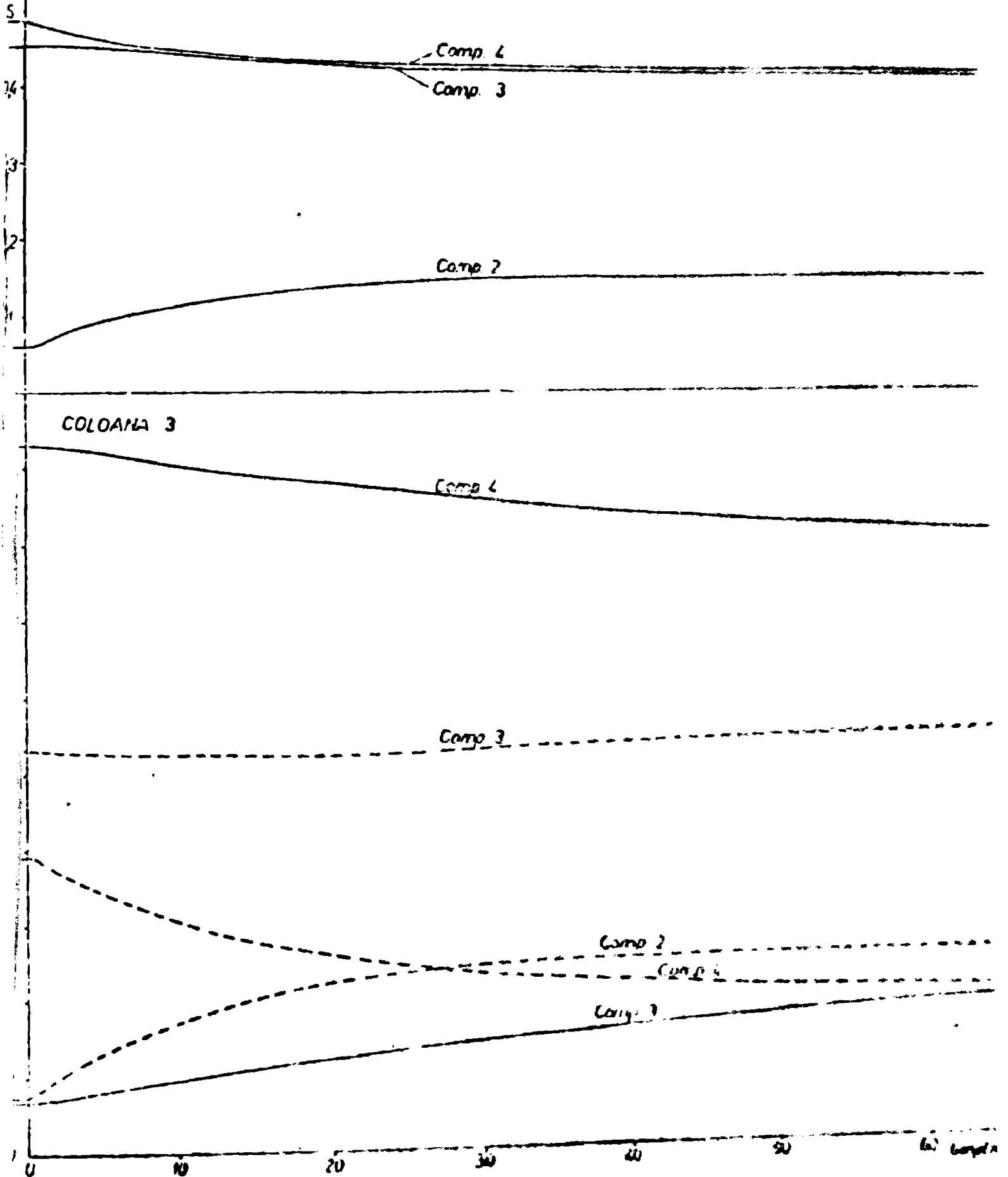
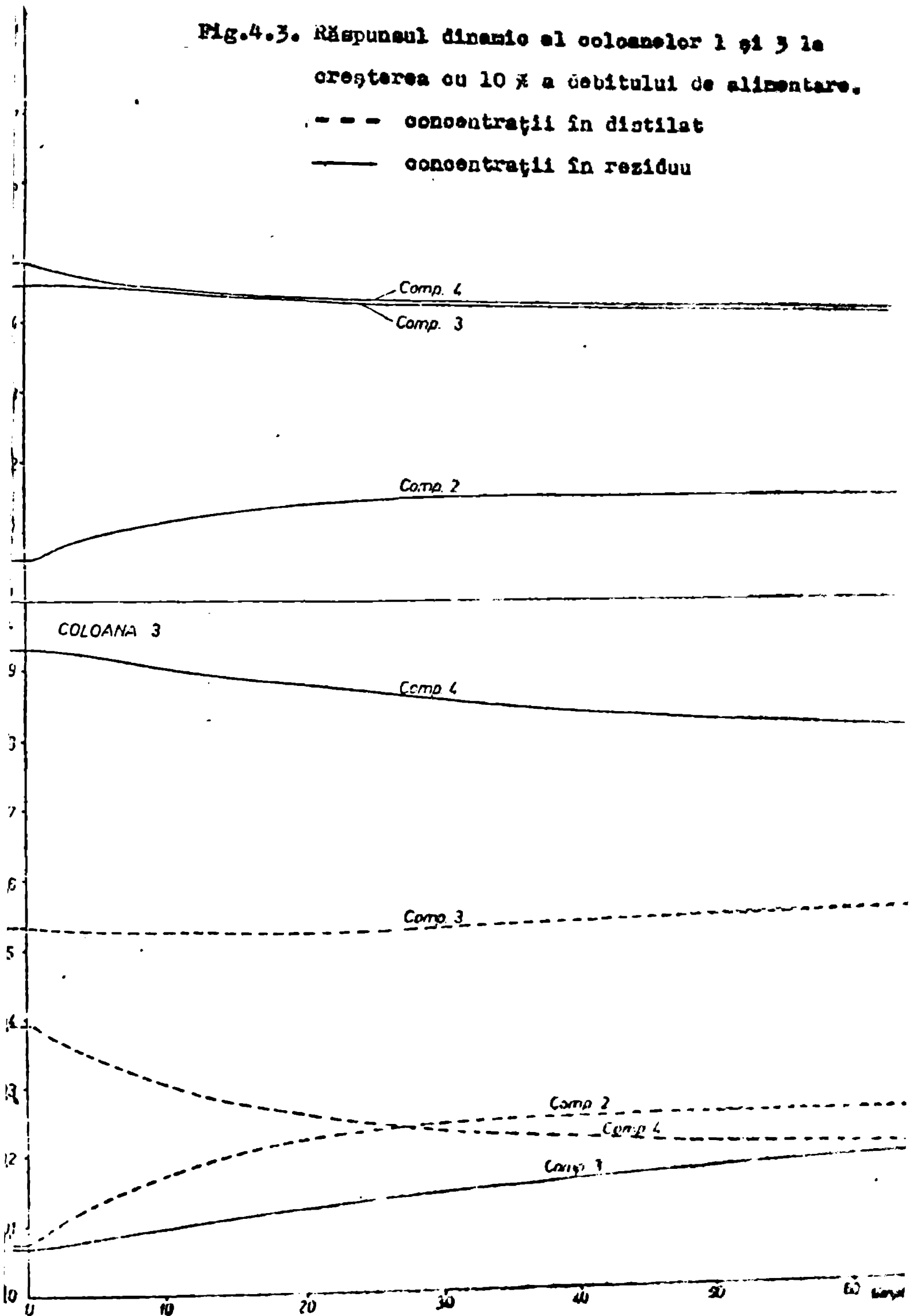


Fig.4.3. Răspunsul dinamic al coloanelor 1 și 3 la creșterea cu 10 % a debitului de alimentare.

- - - concentrații în distilat  
 — concentrații în reziduu



componenti din amestec. In consecință, coloanele 2 și 3 sînt alimentate cu amestecuri îmbogățite în componentii mai volatili. Debitul de alimentare ale acestor coloane sînt deseori mai ridicate prin majorarea celui corespunzător coloanei 1. Drept urmare, la coloana 2 se realizează o separare mai bună a componentilor cheie 1/2, conform creșterii concentrației componentului 1 în distilat și a componentului 2 în rezidu. In schimb coloana 3 nu mai realizează concentrația propusă în bloc ( $X_4 > 0,9$ ), întrucît aici crește concentrația componentului mai volatil 3 în detrimentul componentului 4, ceilalți doi componente nefiind prezenți în rezidu.

In anexă se pot urmări variațiile în timp, pentru fiecare tabel, ale compozițiilor celor două faze, reținerii colare, temperaturii, presiunii și debitelor de lichid și vapor.

Corectitudinea răspunsului dinamic obținut arată că și în cazul sistemelor extinse modelul original propus pentru simularea proceselor de rectificare a amestecurilor multicomponente își menține consistența.

## 5. Concluzii generale

1. In teza de doctorat s-au propus și rezolvat o serie de aspecte legate de utilizarea simulării în domeniul ingineriei sistemelor chimice. Simularea a fost tratată în sensul general al noțiunii ca o activitate de elaborare și utilizare a modelelor matematice.

2. Direcțiile principale de studiu au fost cele ale sintezei și simulării dinamice a sistemelor de separare prin rectificare a amestecurilor multicomponente; abordarea acestora este deplin justificată de frecvența apariției lor în industria chimică și în alte domenii înrudite, precum și de implicațiile economice deosebite pe care le prezintă proiectarea și exploatarea respectivelor sisteme industriale.

3. În cadrul lucrării este elaborată o nouă metodă de sinteză a sistemelor de separare prin rectificare a amestecurilor multicomponente denumită sinteză modulară. Caracteristica esențială a metodei constă în reducerea substanțială a efortului de calcul cerut de soluționarea problemelor de sinteză de sistem, printr-o tratare etapizată: astfel, inițial, sînt elaborate modele de calcul rapid pentru obținerea soluțiilor optime de dimensionare a elementelor componente ale sistemului. Mai multe elemente interdependente funcțional formează un modul, iar sistemul global este sintetizat din astfel de module, constituite din elemente optim dimensionate. Coreșpunător acestei proceduri se obțin nu numai inițiativa asupra configurației sistemului optim cum oferă alte metode (de exemplu cele de tip euristico), ci o sinteză detaliată a unor scheme tehnologice reale, cu aplicabilitate imediată. Respectiva procedură de sinteză modulară permite deseori creșterea numărului de variabile independente, precum și un calcul optim detaliat pen-

tru toate utilajele din sistem, inclusiv proiectarea aparatelor de transfer termic, nu numai a utilajelor principale, respectiv coloanelor de fracționare).

4. Pentru sinteza instalațiilor de separare a amestecurilor multicomponente s-au elaborat modele simplificate pentru calculul optim al elementelor componente: coloanelor de rectificare, condensatoarelor și rețierătoarelor. Aceste modele pot fi utilizate și ca stare în proiectarea independentă a respectivelor utilaje, permițând obținerea rapidă a unor soluții optime, chiar și prin calcul manual.

În scopul dimensionării optime prin o metodă rapidă a a coloanelor de rectificare s-au obținut relații analitice ce permit calculul explicit al raportului optim de reflux. Procedura de obținere a respectivelor relații a decurs astfel: s-a făcut un studiu de parametri în urma cărui s-au deosebit acele care influențează semnificativ raportul optim de reflux; pentru domenii de variație suficient de extinse ale respectivelor parametri s-au obținut relații de corelare a soluțiilor optime în raport cu aceștia; final s-a testat corectitudinea respectivelor corelări.

Obținerea modelelor pentru dimensionarea optimă prin mijloace rapide a condensatoarelor și rețierătoarelor este rezultatul unor tratări analitice adecvate, completate cu anumite simplificări rezultate în urma investigațiilor numerice. Este remarcabilă, în acest context, simplitatea metodei pentru dimensionarea optimă a condensatoarelor propusă în lucrare, față de soluționarea clasică ce necesită rezolvarea unei probleme duale de programare geometrică /29/.

5. Metoda de sinteză modulară propusă în lucrare a fost confruntată cu un set de reguli euristice generate la practica proiectării și exploatării proceselor de rectificare a amestecurilor multicomponente. Acestea s-au făcut prin variația anumitor

parametri (compoziție a alimentării, costuri unitare), rezultatele obținute confirmând corectitudinea metodei de sinteză propusă în lucrare în confruntarea cu regulile euristice considerate.

6. În cadrul tezei de doctorat s-a elaborat un nou model pentru simularea dinamică a proceselor de rectificare a amestecurilor multicomponente.

S-a stabilit o metodă nouă pentru determinarea temperaturii lichidului de pe talerele coloanei, prin care se elimină calculele iterative corespunzătoare, prezente în toate lucrările de specialitate. Drept urmare, s-au creat posibilitățile renunțării la majoritatea ipotezelor simplificatoare utilizate până în prezent în simularea dinamică a proceselor de rectificare /36/. În acest context este demn de menționat că modelul elaborat abordează coloane alcătuite din talere reale, modelate în conformitate cu cinetica proceselor de transfer de masă, tratare originală pentru simularea dinamică a fracționării amestecurilor multicomponente.

7. Datorită originalității și complexității modelului de simulare dinamică elaborat, s-a impus o testare a acestuia atât mai cuprinzătoare atât pe cele teoretică, cât și experimentală.

Testarea teoretică s-a efectuat<sup>uat</sup> prin analiza răspunsurilor sistemului corespunzător unei coloane cu talere reale la diferite tipuri de semnale (treaptă, oscilante) introduse în parametri de operare ai procesului; debite și compoziții de alimentare, raport de reflux, fluxul termic de încălzire al blazului, starea termică a alimentării. Verificarea experimentală a constat în reproducerea comportării în regim dinamic a unei coloane de rectificare de laborator. Toate testele efectuate au confirmat corectitudinea modelului original elaborat în cadrul tezei.

8. Dispunind de garanția corectitudinii rezultatelor, s-a utilizat modelul de simulare dinamică propus pentru aplicații care să prezinte un interes practic corespunzător.

a) O primă aplicație în acest sens a constat în deducerea unor expresii pentru estimarea duratelor regimurilor tranzitorii la pornirea proceselor de rectificare. În acest scop s-au propus parametri care influențează durata regimului tranzitoriu; influența cantitativă a acestor parametri s-a obținut prin utilizarea modelului de simulare dinamică propus în cadrul unui experiment factorial, iar final rezultatele obținute au fost corelate în relații de estimare. Testarea acestora, atât în raport cu experimentul factorial efectuat, cât și cu alte cazuri, au indicat concordanțe satisfăcătoare. Menționând că în literatură nu există lucrări în acest sens, se remarcă utilitatea estimării duratelor de intrare în regim a proceselor de rectificare pentru planificarea producției și evaluarea consumurilor de utilități.

b) O altă aplicație a modelului de simulare propus a constat în identificarea unei strategii ce permite reducerea duratei regimului tranzitoriu la pornirea proceselor de rectificare. Strategia constă în: începerea unui așa-numit "șereteo de pornire" cu care se încearcă colanș de rectificare, pornirea la reflux total și conșutarea pe refluxul de lucru, concomitent cu desșchiderea alimentărilor și evșouărilor, în momentul în care temperaturile din virș și blaz prezintă valori apropiate de cele prescrișe pentru regimul staționar.

Pentru aplicație studiată în acest sens, s-a obținut o reducere a duratei regimului tranzitoriu de pornire cu peste 50%. Sînt necesare pe viitor a se face investigații suplimentare în acest sens, direct în instalații industriale. Scurtarea duratei

regimului tranzitoriu la pornirea proceselor de rectificare, chiar și în proporții mai reduse decât cea obținută în cazul exemplificativ studiat, prezintă un interes economic evident prin diminuarea corespunzătoare a consumurilor energetice și creșterea productivității întregii instalații.

9. În partea finală a tezei s-a demonstrat posibilitatea utilizării modelului original la simulare dinamică la verificarea dimensionării prin metodele de calcul rapid a coloanelor de rectificare, precum și la analize în regim dinamic a unui sistem de coloane interconectate. Respectivul tratament permite atât o proiectare, cât și o exploatare corectă a sistemelor industriale corespunzătoare instalațiilor de fracționare prin rectificare a amestecurilor multicomponente, cu consecințe economice favorabile.



BIBLIOGRAFIE

1. Churchman, C.W., "An Analysis of the Concept of Simulation", Symposium on Simulation Models, South-Western Publishing Co., Cincinnati, 1963
2. Woinaroschy, A., Szigelschi O., "Ingineria sistemelor și optimizarea proceselor chimice", Editura Didactică și Pedagogică, București, 1983.
3. Woinaroschy, A., "Ingineria sistemelor chimice - note de curs și aplicații" Institutul Politehnic București, 1983
4. Rudd, D.F., In: A.I.Ch.E. Journ., Vol. 12, nr. 2, 1968, p. 343
5. Rudd, D.F., Powers, G.J., Siirole, J.J., "Process Synthesis" Prentice Hall, New Jersey, 1973
6. Lee, K.F., Masso, A.H., Rudd, D.F. In: I.E.C. Transm. vol. 9, nr. 1, 1970, p. 48
7. Kobayashi, S., Ueda, T., Ichikawa, A. In: Chem. Engng. Sci., vol. 26, nr. 9, 1971, p. 1367
8. Nishida, N., Kobayashi, S., Ichikawa, A. In: Chem. Engng. Sci. vol. 26, nr. 11, 1971, p. 1841
9. Nishikura, H., Hiraizumi, Y., In: Intern. Chem. Engng. vol. 11 nr. 1, 1971, p. 188
10. Hendry, J.E., Hughes, R.R. In: Chem. Engng. Prog., vol. 68, nr. 6, 1972, p. 71
11. Thompson, R. W., King, C.J., In: A.I.Ch.E. Journ. vol. 18, nr. 5, 1972, p. 941
12. Retnore, R. N.S., Worker Van, K.A., Powers, G.J. In: A.I.Ch.E. Journ. vol. 20 nr. 3, 1974, p. 491
13. Westerberg, A.W., Stephanopoulos, G. In: Chem. Engng. Sci., vol. 30, nr. 8, 1975, p. 963
14. Stephanopoulos, G., Westerberg, A.W., In: Chem. Engng. Sci., vol. 31, nr. 2, 1976, p. 195.

15. Umeda, T., Hirai, A., Ionikawa, A. In: Chem.Engng.Sci., vol. 27, nr. 4, 1972, p. 795
16. Osekada, K., Fan, L.T., In: Canad.Journ.Chem.Engng.vol.51, nr. 2, 1973, p. 94
17. Siirola, J.J., Powers, G.J., Ruid, D.F., In: A.I.Ch.E. Journ., vol.17, nr. 3, 1971, p. 678
18. Siirola, J.J., Ruid, D.F., In: I.E.C. Fundam, vol. 10, nr. 3, 1971, p. 353
19. Powers, G.J. In: Chem.Engng. Progr. vol. 68, nr. 8, 1972, p. 88
20. Powers, G. J., Cummings, D.L., Rathore, R.W.S., In: A.I.Ch.E., Journ. vol. 21, nr. 1, 1975, p.90
21. Umeda, T., Ionikawa, A. In: Chem. Engng. Sci., vol. 30, nr. 4, 1975, p. 699
22. Koczek, S.J., Otto, A.R., Williams, J.F. In: Chem. Eng. Progr. Symp. Ser. vol. 61, nr. 55, 1965, p.136
23. Peters, A.S., Fisherhaus, K.O., "Plant Design and Economics for Chemical Engineers", Mc. Graw-Hill, New York, 1969.
24. Winkle, Van, K., Todd, W., S. In: Chem. Engng. 1971, p.136
25. Saigelschi, O., Woinaroschy, A. "Optimizarea proceselor in industria chimica", Editura Tehnica, Bucuresti, 1978
26. Woinaroschy, A., Saigelschi, C. In: Rev. Chim., vol. 32, nr. 6, 1981, p. 541
27. Bratu, Em. A. "Operatii si utilaje in industria chimica", vol. 1,2, Editura Tehnica, Bucuresti, ed. II, 1970
28. Floarea, O., Dima, R., "Procese de transfer de caldura si utilaje specifice", Editura Didactica si Pedagogica, Bucuresti, 1984.

29. Avriel, M., Wilde, D.J. In: I.E.C. Proc. Des. Develop.,  
vol. 6, nr. 2, 1967, p. 256
30. Floresca O., Jinescu, G., Balaban, C., Vasilescu, P., Dima, R.,  
"Operații și utilaje în industria chimică - pro-  
bleme", Editura Didactică și Pedagogică, Bucureș  
1980
31. Manualul inginerului chimist. vol. II, Editura Tehnică,  
București, 1972.
32. Hendry, J.E., Rudi, D.F., Sessler, J.D. In: A.I.Ch.E., Journ.  
vol. 19, nr. 1, 1973, p. 1
33. Wohl, F.E., Harriot, P. In: I.E.C. Proc. Des. Develop.,  
vol. 9, nr. 3, 1970, p. 396
34. Hackata, S.C., Franke, R.F., Kay, P.F., Fairchild, T.B.,  
Distefano, P.G. In: Chem. Eng. Progr. Symp. Ser.,  
vol. 61, nr. 55, 1965, p. 126
35. Tetlow, J.N., Groves, M.D., Hollani, D.C. In: A.I.Ch.E. Journ  
vol. 13, nr. 5, 1967, p. 641
36. Strătuță, C., Mariniciu, V., Soreseu, G., "Metode și programe  
de calcul al proceselor de distilare, fracționare  
și absorbție, Editura Tehnică, București, 1976.
37. Hajdu, H., Borus, A., Fölies, P. In: Chem. Engng. Sci.,  
vol. 33, nr. 1, 1978, p. 1
38. Iurcan, J., Kunkel, H. In: Chem. Engng. Sci., vol. 34,  
nr. 4, 1979, p. 455
39. Franke, R.G.E., Modeling and Simulation in Chemical Engi-  
neering, John Wiley, New York, 1972
40. Jinescu, G. "Procese hidrodinamice și utilaje specifice în  
industria chimică", Editura Didactică și Pedago-  
gică, București, 1976.
41. Robu, V., "Distilare-fracționare", Editura Tehnică, București, 1

42. Florescu, O., Smigulachi, O., "Calculul de operatii și utilaje în industria chimică", Editura Tehnică, București, 1966
43. Murphree, E.V., In: Ind. Engng. Chem., vol. 17, 1925, p. 747
44. Holland, C.D., "Fundamentals and Modeling of Separation Processes", Prentice Hall, New Jersey, 1975
45. Wilke, - - In: J. Chem. Phys. vol. 18, 1950, p. 517
46. Wilke, - - In: Chem. Engng. Progr. vol. 46, 1950, p. 95
47. Bird, R.E., Hirschfelder, J.C., Curtiss, C.F., In: Trans. A.S.E.E., vol. 76, 1954, p. 1011
48. Wilke, Engg. In: A.I.Ch. E. Journ. vol. 1, 1955, p. 264
49. Le Fers, R.L., "Computer Methods for Science and Engineering", Hayden Book, New Jersey, 1973.
50. Operating System RSX - 11 A - Scientific Subroutines Library
51. Kazarov, V., "Cybernetic Methods in Chemistry and Chemical Engineering", Mir Publishers, Moscow, 1976.
52. Mihail, R., "Introducere în strategia experimentării cu aplicații din tehnologia chimică", Editura Științifică și Enciclopedică, București, 1976.
53. Brachille, A., Corraciolo, D.P., K., Jelati, Krishna J.R., Nardini, G., In: Chem. Engng. vol., v.1. 26, 1971, p. 1101
54. Catalog de ordine de prețuri nr. 15/1984
55. Lockhart, P.J., In: Petrol. Refiner, vol. 2, 1947, p. 104
56. Herbert, W.D., In: Petrol. Refiner, vol. 36, 1957, p. 169
57. Rul, V., Berok, J. In: Coll. Czech. Chem. Comm., vol. 24, 1959, p. 3140
58. Ionescu-Bălcăuț, M., "Căile de istorie", Institutul Cultural București, 1972

59. Lashon, L., "Teoria optimizării sistemelor mari". (trad: din lb. engleză), Editura Tehnică, București, 1975
60. Petlyuk, K.B., Flatonov, V.M., Slavinskii, D.M., In: Intn. Chem. Engng. vol. 5, 1965, p. 555
61. Tedder, W.D., Rudd, D.F., In: A.I.Ch. E. Journ. vol. 24, nr. 2, 1978, p. 303