

II.4.9. Coloane de distilare

Distilarea este, probabil, cea mai comună operație unitară din industria chimică. Ea poate avea loc atât în coloane cu talere cât și în turnuri cu umplutură. Pentru regimul dinamic al coloanelor de distilare s-au dezvoltat modele de complexitate diferită în funcție de ipotezele luate în considerare la dezvoltarea modelelor, ipoteze care, la rândul lor, au în vedere complexitatea cazului luat în discuție: de la distilarea discontinuă sau o simplă separare binară până la sisteme multicomponent neideale, cu reacții chimice ce însoțesc procesul de separare, alimentări multiple și eventuale evacuări de fracții laterale.

II.4.9.1 Modele bazate pe conceptul de "taler teoretic".

Primele dezvoltări legate de modelarea coloanelor au pornit de la conceptul de "treapta în echilibru" sau "taler teoretic" ("equilibrium stage" sau "theoretical plate"). Pentru un astfel de taler, vaporii și lichidul de pe taler se consideră a fi în echilibru: potențialul chimic al oricărui component este același atât în lichid cât și în vapori iar vaporii se găsesc la aceeași temperatură ca și lichidul. Modelul matematic al unui taler teoretic pornește de la scrierea ecuațiilor de bilanț (masă și energie) în jurul talerului, soluționarea numerică fiind relativ simplă dacă se dispune de date termodinamice referitoare la echilibrul fazelor lichidă și vapori.

În realitate, coloanele nu se comportă conform principiului de "taler teoretic". Pentru a adapta modelul la realitatea echipamentului, s-au introdus următoarele concepte:

- cel de "eficiență" ("Murphree vapour efficiency") în cazul coloanelor cu talere. Se considera că pe talerul real compoziția vaporilor atinge doar o fracție din compoziția aferentă unui taler teoretic, fracția care dictează "eficiența" talerului.

- cel de "înălțime echivalentă cu un taler teoretic" (HETP - "height equivalent to a theoretical plate") în cazul coloanelor cu umplutură. Fie x_A^h compoziția lichidului în componentul A la înălțimea h . Dacă vaporii care au compoziția y_A^h ce corespunde echilibrului termodinamic cu mai sus menționata compoziție a lichidului se întâlnesc la înălțimea $h+\Delta h$, înălțimea Δh poartă numele de înălțimea echivalentă unui taler teoretic (distanța la care întâlnim în coloană vaporii în echilibru cu o anumită compoziție a lichidului).

Ecuațiile generale ale talerului în cazul unui amestec multicomponent.

În scrierea ecuațiilor de bilanț pentru un taler al unei coloane de distilare în cazul unui amestec multicomponent, vom porni de la următoarele presupuneri:

- lichidul aflat pe taler este perfect amestecat și incompresibil;
- retenția de vapori pe taler este neglijabilă;

- vaporii și lichidul de pe taler au aceeași temperatură (echilibru termic) dar nu sunt în echilibru de fază. În vederea descrierii depărtării față de echilibru, se va utiliza eficiența Murphree;

Talerul este prevăzut cu posibile alimentări laterale atât cu flux de vaporii cât și de lichid și de asemenea cu evacuare laterală de lichid și de vaporii de pe taler.]

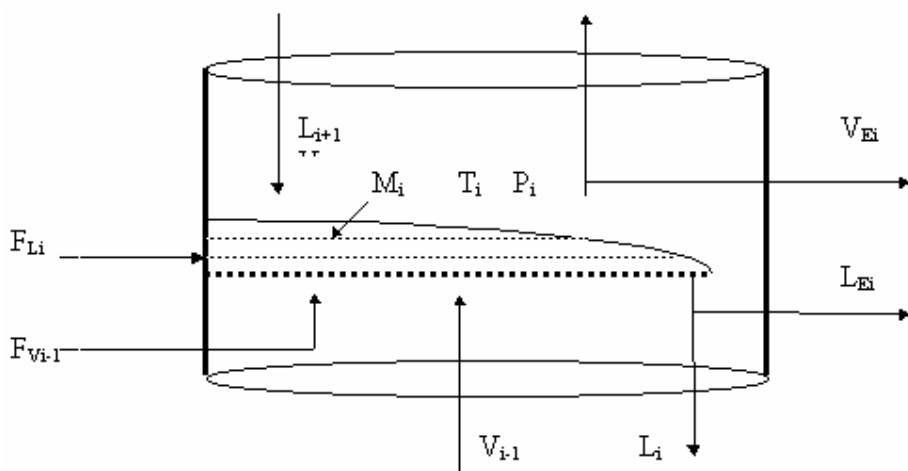


Figura II.4.33 Talerul "i" al unei coloane multicomponent.

Notății utilizate: M - retenția de lichid (kmoli); L - flux de lichid (kmoli/s); V - flux de vaporii (kmoli/s); F - flux de alimentare (kmoli/s); indici - L - lichid, V - vaporii, E - ieșire în exteriorul coloanei.

Ecuțiile care descriu talerul[12].

Pentru un taler "i" (coloana cu "n" talere) și pentru un component "j" (amestec multicomponent având "k" componenți), se pot scrie:

- bilanțul total de materiale în regim dinamic:

$$\frac{dM_i}{dt} = L_{i+1} + F_{Li} + F_{Vi-1} + V_{i-1} - V_i - V_{Ei} - L_i - L_{Ei} \quad (\text{II.4.149})$$

- bilanțul de materiale pentru un component (k-1 ecuații):

$$\frac{d(M_i \cdot x_i^j)}{dt} = L_{i+1} \cdot x_{i+1}^j + F_{Li} \cdot x_{Fi}^j + F_{Vi-1} \cdot y_{Fi-1}^j + V_{i-1} \cdot y_{i-1}^j - V_i \cdot y_i^j - V_{Ei} \cdot y_i^j - L_i \cdot x_i^j - L_{Ei} \cdot x_i^j \quad (\text{II.4.150})$$

- bilanțul energetic în regim dinamic (h - entalpia lichidului; H - entalpia vaporilor; U - energia internă, toate exprimate în kJ/kmol):

$$\frac{d(M_i \cdot U_i)}{dt} = L_{i+1} \cdot h_{i+1} + F_{Li} \cdot h_{Fi} + F_{Vi-1} \cdot H_{Fi-1} + V_{i-1} \cdot H_{i-1} - V_i \cdot H_i - V_{Ei} \cdot H_i - L_i \cdot h_i - L_{Ei} \cdot h_i \quad (\text{II.4.151})$$

- echilibrul fazelor (k ecuații pentru fiecare taler):

$$(y_i^j)^* = f(x_i^j, P_i, T_i) \quad (\text{II.4.152})$$

Pentru un taler neideal, compoziția vaporilor care părăsesc talerul se poate calcula folosindu-se relația de definiție a eficienței Murphree (y_{Mi-1}^j - compoziția medie a vaporilor care intră pe taler - fluxurile F_{Vi-1} și V_{i-1}):

$$E_i^j = \frac{y_i^j - y_{Mi-1}^j}{(y_i^j)^* - y_{Mi-1}^j} \quad (\text{II.4.153})$$

- expresiile entalpiilor ca și funcții de compoziție, temperatură și presiune:

$$\begin{aligned} h_i &= f(x_i^j, T_i) \\ H_i &= f(y_i^j, T_i, P_i) \\ U_i &= f(x_i^j, T_i, P_i) \\ h_{Fi} &= f(x_{Fi}^j, T_{Fi}) \\ H_{Fi} &= f(y_{Fi}^j, T_{Fi}, P_{Fi}) \end{aligned} \quad (\text{II.4.154})$$

- ecuațiile curgerii referitoare la lichid și vapori:

$$\begin{aligned} L_i &= f(M_i, V_i, x_i^j, T_i, P_i) \\ V_{Ti} &= f(P_i, P_{i-1}, y_i^j, T_i) \end{aligned} \quad (\text{II.4.155})$$

unde V_{Ti} este suma celor două fluxuri de vapori care părăsesc talerul "i". Fluxul de vapori depinde de căderea de presiune după o relație de forma:

$$V_{Ti} = K_{\Delta P} \cdot \rho_{Vi} \sqrt{(P_{i-1} - P_i)} \quad (\text{II.4.156})$$

În relația (II.4.156), ρ_{Vi} este densitatea vaporilor.

Ecuțiile algebrice (II.4.152) - (II.4.155) pot fi folosite pentru a elimina $2k+4$ variabile ($V_i, P_i, L_i, U_i, h_i, H_i$ și $k-1$ din cele k variabile y_i^j respectiv $k-1$ valori de echilibru din cele k valori $(y_i^j)^*$). În consecință, modelul de bază al unui taler se reduce la $k+1$ ecuații diferențiale pentru fiecare taler.

Într-o manieră similară se deduc și ecuațiile care descriu comportarea dinamică a blazului și condensatorului coloanei.

II.4.9.2 Exemplu numeric: coloana de distilare pentru un amestec binar ideal.

Talerele coloanei de distilare se consideră a fi talere teoretice. Deci, dacă este vorba de un număr total de 15 talere iar eficiența talerelor este de 66%, simularea va fi realizată cu:

$$15 \cdot 0.66 = 10 \text{ talere teoretice.}$$

Totodată, acumularea de pe talerul teoretic trebuie recalculată ținând cont de reducerea numărului de talere:

$$\text{acumulare taler teoretic} = (\text{acumulare taler real})/0.66.$$

Presupuneri asupra comportării coloanei:

- volatilitatea relativă este constantă în lungul coloanei (în cazul separării unor componente din aceeași clasă - hidrocarburi, alcooli, etc. ea poate fi considerată independentă de compoziție și presiune; acest lucru nu este însă valabil pentru amestecuri neideale cum ar fi azeotropii) iar vaporii care părăsesc talerul sunt în echilibru cu lichidul de pe taler; dacă x și respectiv y sunt fracțiile molare ale componentului mai volatil în lichid și respectiv în vapori, echilibrul lichid - vapori este caracterizat, pentru talerul "i", prin:

$$y_i = \frac{\alpha \cdot x_i}{1 + (\alpha - 1) \cdot x_i} \quad (\text{II.4.157})$$

Pentru un amestec ideal la care se poate aplica legea lui Raoult, volatilitatea relativă se poate estima pe baza caldurii molare de vaporizare și a diferenței dintre temperaturile de fierbere (T_{F1} și T_{F2} sunt temperaturile de fierbere ale celor doi componenți, ΔT_F - diferența lor):

$$\ln(\alpha) = \frac{\Delta H_{vap}}{R \cdot \sqrt{T_{F1} \cdot T_{F2}}} \cdot \frac{\Delta T_F}{\sqrt{T_{F1} \cdot T_{F2}}} \quad (\text{II.4.158})$$

- căldurile molare de vaporizare ale ambilor componenți sunt apropiate ca și valori (ceea ce înseamnă că un mol de vapori prin condensare evaporă un mol de lichid) iar pierderile de caldură spre exterior sunt neglijabile; în consecință, în regim staționar fluxurile de lichid și vapori deasupra și sub talerul de alimentare sunt constante în regim staționar (fluxuri molare constante).

- retenția de vapori pe taler este neglijabilă, și deci, având în vedere presupunerea anterioară, fluxul de vapori este constant în lungul coloanei și în regim dinamic:

$$V_1 = V_2 = \dots = V_i = \dots = V_N \quad (\text{II.4.159})$$

În ceea ce privește fluxul de lichid de la un taler la altul, acesta nu este constant și în regim dinamic, el depinzând de caracteristicile talerului și de regimul de curgere:

$$L_i = f(M_i) \quad (\text{II.4.160})$$

Schema coloanei de distilare este prezentată în figura II.4.34.

Amestecul binar intră în coloană cu debitul F_A , fracția molară a componentului mai volatil este x_A iar temperatura amestecului – temperatura de fierbere, lichidul fiind deci saturat cu vapori.

Coloana este prevăzută cu următoarele sisteme de reglare automată:

- TC-1 = reglarea temperaturii la vârful coloanei (prin intermediul debitului de reflux), în vederea obținerii unei compoziții constante a distilatului;
- TC-2 = reglarea temperaturii în blaz (prin modificarea debitului de abur) pentru menținerea constantă a compoziției în blaz;
- LC-1 = reglarea nivelului în tancul de distilat;
- LC-2 = reglarea nivelului în blaz.

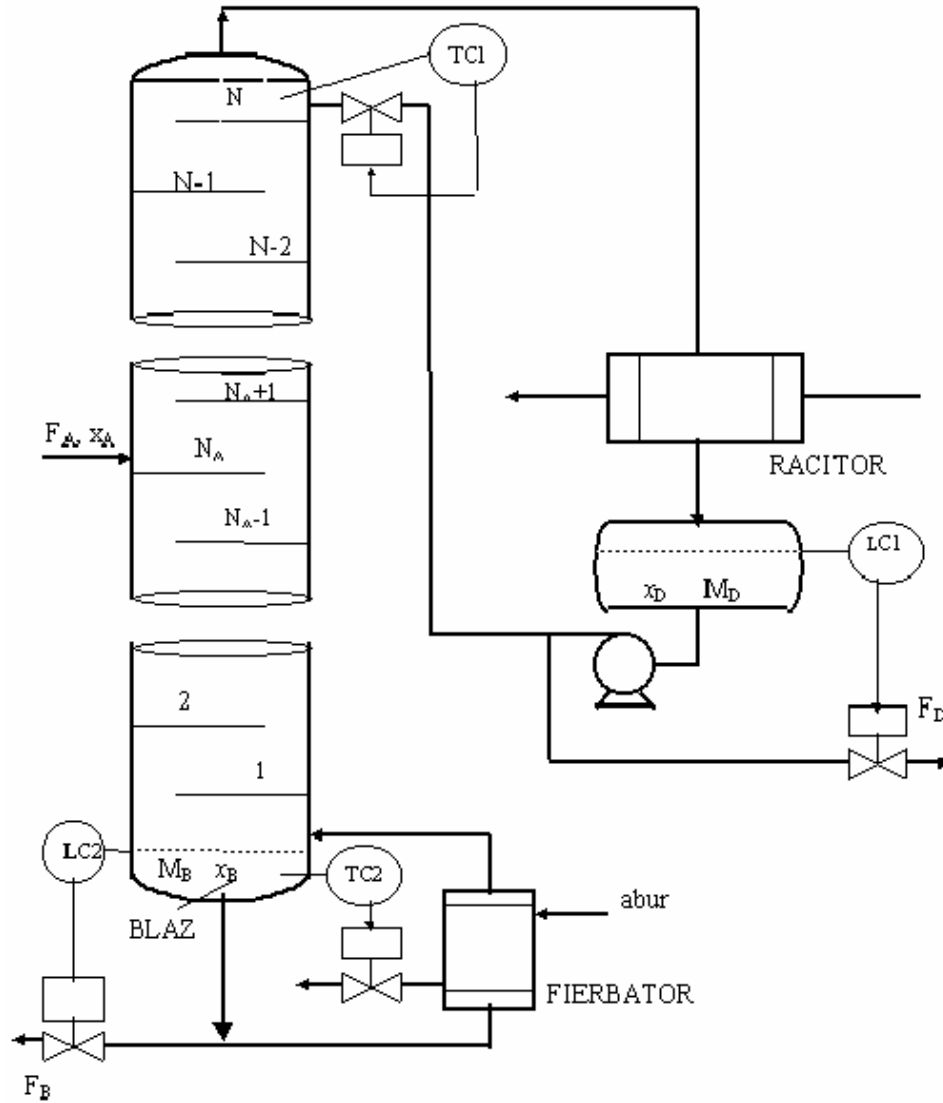


Figura II.4.34 Coloana de distilare pentru un amestec binar ideal : N talere, reglări de temperatură (vârful coloanei și blaz) și reglări de nivel (tancul de distilat și blaz).

a). Modelul matematic al coloanei de distilare.

Pentru fiecare taler se pot scrie:

- bilanțul total de materiale în regim dinamic:

$$\frac{dM_i}{dt} = L_{i+1} - L_i \quad (\text{II.4.161})$$

- bilanțul de materiale în regim dinamic pentru componentul mai volatil:

$$\frac{d}{dt}(M_i \cdot x_i) = L_{i+1} \cdot x_{i+1} - L_i \cdot x_i + V \cdot y_{i-1} - V \cdot y_i \quad (\text{II.4.162})$$

- echilibrul vapori - lichid:

$$y_i = \frac{\alpha \cdot x_i}{1 + (\alpha - 1) \cdot x_i} \quad (\text{II.4.163})$$

- dependența dintre fluxul și retenția de lichid de pe taler (pentru simplitate, se consideră că această dependență este liniară - M_s este retenția de lichid în regim staționar iar r_h este rezistența hidraulică a talerului):

$$L_i = L_s + \frac{M_i - M_s}{r_h} \quad (\text{II.4.164})$$

Ecuțiile de mai sus trebuie particularizate pentru blaz, talerul de alimentare, ultimul taler al coloanei și rezervorul de distilat.

- blaz:

$$\frac{dM_B}{dt} = L_1 - F_B - V \quad (\text{II.4.165})$$

$$\frac{d}{dt}(M_B \cdot x_B) = L_1 \cdot x_1 - F_B \cdot x_B - V \cdot y_B \quad (\text{II.4.166})$$

- talerul de alimentare:

$$\frac{dM_{na}}{dt} = L_{na+1} - L_{na} + F_A \quad (\text{II.4.167})$$

$$\frac{d}{dt}(M_{na} \cdot x_{na}) = L_{na+1} \cdot x_{na+1} - L_{na} \cdot x_{na} + V \cdot y_{na-1} - V \cdot y_{na} + F_A \cdot x_A \quad (\text{II.4.168})$$

- talerul N:

$$\frac{dM_N}{dt} = F_R - L_N \quad (\text{II.4.169})$$

$$\frac{d}{dt}(M_N \cdot x_N) = F_R \cdot x_D - L_N \cdot x_N + V \cdot y_{N-1} - V \cdot y_N \quad (\text{II.4.170})$$

- condensatorul și rezervorul de distilat:

$$\frac{dM_D}{dt} = V - F_R - F_D \quad (\text{II.4.171})$$

$$\frac{d}{dt}(M_D \cdot x_D) = V \cdot y_N - (F_R + F_D) \cdot x_D \quad (\text{II.4.172})$$

b). Regimul staționar

În regim staționar, acumularea este zero iar între fluxuri există relațiile (R este cifra de reflux):

$$V = F_D \cdot (R + 1) \quad (\text{II.4.173})$$

$$F_R = V - F_D \quad (\text{II.4.174})$$

$$F_B = F_A - F_D \quad (\text{II.4.175})$$

Pentru talerile 1 - Na, fluxul de lichid de la un taler la altul este identic cu suma dintre debitul de reflux și debitul de alimentare iar compoziția distilatului este aceeași cu cea a fluxului de vapori de pe talerul N:

$$L_B = F_A + F_R \quad (\text{II.4.176})$$

$$x_D = y_N \quad (\text{II.4.177})$$

Pentru talerele de deasupra celui de alimentare, acest flux este identic cu debitul de reflux.

Având în vedere relațiile de mai sus și datele inițiale referitoare la coloană (numărul total "N" de talere ,fluxul de alimentare F_A și compoziția alimentării x_A , debitul de distilat F_D cifra de reflux "R", volatilitatea relativă " α " și numărul talerului de alimentare " n_a "), rezultă că pentru a obține compoziția pe talere și în blaz, trebuie să soluționăm un sistem de $2 \cdot N + 2$ ecuații neliniare, câte două ecuații pentru fiecare taler și respectiv pentru blazul coloanei:

$$L \cdot x_{i+1} - L \cdot x_i + V \cdot y_{i-1} - V \cdot y_i = 0 \quad (\text{II.4.178})$$

$$y_i - \frac{\alpha \cdot x_i}{1 + (\alpha - 1) \cdot x_i} = 0 \quad (\text{II.4.179})$$

Aceste două ecuații iau forme particulare pentru blaz, primul și ultimul taler și pentru talerul de alimentare.

NOTA. Bilanțul total de materiale al coloanei în regim staționar și cel pentru componenta mai volatilă :

$$F_A = F_D + F_B \quad (\text{II.4.180})$$

$$F_A \cdot x_A = F_D \cdot x_D + F_B \cdot x_B \quad (\text{II.4.181})$$

arată faptul că nu se pot fixa în același timp și F_D și F_B iar alegerea debitelor influențează puternic și compozițiile fluxurilor de ieșire din coloană. Dacă x_A se modifică, pentru a avea aceleași compoziții în distilat și în blaz trebuie schimbate valorile fluxurilor de ieșire. Din punct de vedere al reglării compoziției, este mai eficient să se lucreze prin debite decât acționând asupra cantității de caldură dată coloanei.

În relația II.4.181 avem însă două necunoscute x_D și x_B și deci, pentru o soluție unică, mai avem nevoie de o relație. În acest scop se folosește ecuația lui Fenske (aceasta se referă la estimarea numărului de talere pentru a efectua o separare dată între componente în condițiile de reflux total) modificată pentru situații diferite de cea de reflux total:

$$\frac{x_B \cdot (1 - x_A)}{x_A \cdot (1 - x_B)} = S_F \quad (\text{II.4.182})$$

unde S_F , factorul de separare, depinde de volatilitatea relativă, numărul de talere, fluxul energetic, etc.

Pentru simularea numerică s-au folosit următoarele date (amestec benzen – toluen):

- fluxul de alimentare $F_A = 500$ kmol/h, fracția de masă a benzenului în acest flux $x_A=0.45$ kmol/kmol;
- cifra de reflux $R=2.5$;
- volatilitatea relativă $\alpha=2.4$;
- numărul de talere $N=10$, talerul de alimentare - talerul 5 ($n_a=5$);
- debitul de distilat $F_D=225$ kmol/h.

Programul principal folosește pentru soluționarea sistemului de ecuații neliniare algoritmul LEVENBERG - MARQUARDT (selecționat prin opțiunea "1" din apelarea rutinei "fsolve"). Vectorul de start se obține considerând ca valori pentru compoziția în benzen a lichidului în blazul și distilatul coloanei valorile de 0.94 și respectiv 0.04 kmol/kmol, respectiv valori spațiate echidistant pentru compoziția pe talere. Compoziția vaporilor se obține pe baza relației de echilibru lichid - vapori. Vectorul funcțiilor este definit în fișierul "fdistst.m".

```
% DISTILARE : AMESTEC IDEAL (BENZEN - TOLUEN);
%
% REGIM STATIONAR.

global N alfa na xA FA FD R
% Caracteristici flux alimentare:
FA=500;xA=0.45;
% Cifra de reflux, debit de distilat:
R=2.5;FD=225;
FB=FA-FD;
% Volatilitatea relativa, numar talere, taler alimentare:
alfa=2.4;N=10;na=5;
% Solutia de start:
xB0=0.04;xD0=0.94;pasx=(xD0-xB0)/N;
xstart=xB0:pasx:xD0;
for i=1:N+1
    ystart(i)=alfa*xstart(i)/(1+(alfa-1)*xstart(i));
end;
nv=2*N+2
% Vectorul de start:
for k=1:2:nv-1
    xv(k)=xstart((k+1)/2);
end;
for k=2:2:nv
    xv(k)=ystart(k/2);
end;
xvsol=xv';
```

```

% Solutionarea sistemului de ecuatii neliniare prin algoritmul
%      LEVENBERG - MARQUARDT:
xsol=fsolve('fdistst',xvsol,1);
xBst=xsol(1);yBst=xsol(2);
for k=3:2:nv-1
    xst((k-1)/2)=xsol(k);
end;
for k=4:2:nv
    yst(k/2-1)=xsol(k);
end;
xDst=yst(N);
% Compozitia in blaz si compozitia distilatului:
disp('      xB      yB      xD'); disp([xBst yBst xDst]);
% Compozitia pe talere:
disp('      taler,      xi,      yi');
for i=1:10
    disp([i xst(i) yst(i)]);
end;

```

Fișierul de tip funcție "fdistst.m" are ca intrare vectorul "xv", vector ce reunește compoziția lichidului și vaporilor în blaz și pe talere iar ca ieșire evaluările "fdist" ale funcțiilor ce definesc sistemul de ecuații neliniare.

```

function fdist=fdistst(xv)
global N alfa na xA FA FD R
nv=2*N+2;
fdist=zeros(nv,1);
V=FD*(R+1);
FR=V-FD;
LB=FR+FA;
FB=FA-FD;
xB=xv(1);yB=xv(2);
for k=3:2:nv-1
    x((k+1)/2-1)=xv(k);
end;
for k=4:2:nv
    y(k/2-1)=xv(k);
end;
fbmB=LB*x(1)-V*yB-FB*xB;
fechB=yB+(alfa-1)*yB*xB-alfa*xB;
fbm(1)=LB*x(2)-LB*x(1)+V*yB-V*y(1);
fech(1)=y(1)+(alfa-1)*y(1)*x(1)-alfa*x(1);
for i=2:na-1
    fbm(i)=LB*x(i+1)-LB*x(i)+V*y(i-1)-V*y(i);
    fech(i)=y(i)+(alfa-1)*y(i)*x(i)-alfa*x(i);
end;
fbm(na)=FR*x(na+1)-LB*x(na)+V*y(na-1)-V*y(na)+FA*xA;
fech(na)=y(na)+(alfa-1)*y(na)*x(na)-alfa*x(na);

```

```

for i=na+1:N-1
    fbm(i)=FR*x(i+1)-FR*x(i)+V*y(i-1)-V*y(i);
    fech(i)=y(i)+(alfa-1)*y(i)*x(i)-alfa*x(i);
end;
fbm(N)=FR*y(N)-FR*x(N)+V*y(N-1)-V*y(N);
fech(N)=y(N)+(alfa-1)*y(N)*x(N)-alfa*x(N);
fdist(1)=fbmB;
fdist(2)=fechB;
for k=3:2:nv-1
    fdist(k)=fbm((k-1)/2);
end;
for k=4:2:nv
    fdist(k)=fech(k/2-1);
end;

```

La rularea programului, se obțin valorile compoziției vaporilor și lichidului în blaz și pe fiecare taler, respectiv compoziția distilatului - identică cu cea a vaporilor de pe ultimul taler :

COUNT	RESID	STEP-SIZE	GRAD/SD
23	6982.15	1	-1.4e+004
49	1351.74	1.44	6.14e+003
74	0.00056775	1	-0.000216
99	2.49195e-007	1.01	-1.28e-007
124	3.47237e-014	1	-1.59e-014

Optimization Terminated Successfully

	xB	yB	xD
	0.0412	0.0934	0.9497
taler,		xi,	yi
1.0000		0.0799	0.1725
2.0000		0.1385	0.2784
3.0000		0.2170	0.3995
4.0000		0.3067	0.5150
5.0000		0.3924	0.6078
6.0000		0.4711	0.6813
7.0000		0.5739	0.7637
8.0000		0.6893	0.8419
9.0000		0.7988	0.9050
10.0000		0.8872	0.9497

O prezentare grafică a compoziției fazelor lichidă și vapori este efectuată în figura II.4.35. Talerul « 0 » este blazul.

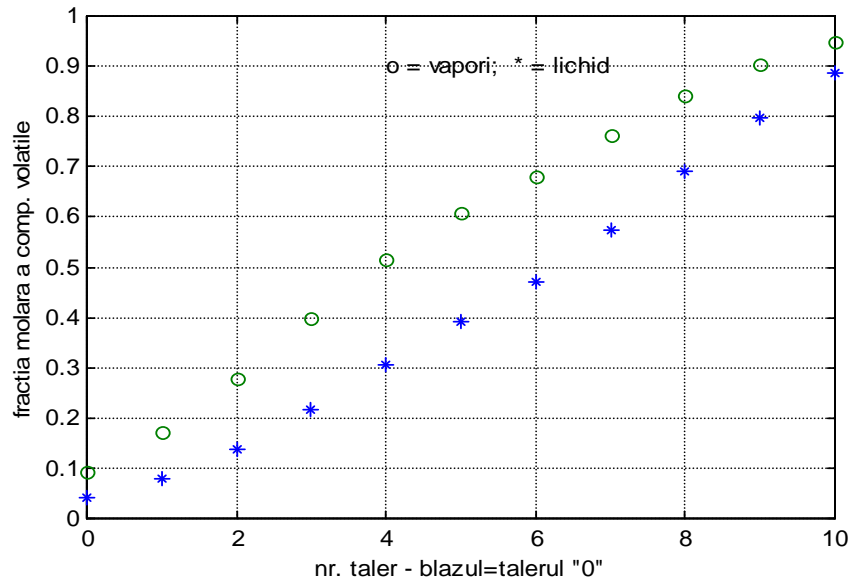


Figura II.4.35 Compoziția fazelor lichidă și vapori pe talere în regim staționar.

c). Regimul dinamic.

Ecuțiile modelului matematic al unui taler al coloanei de distilare binară au fost prezentate la punctul a – este vorba de ecuațiile II.4.161 – II.4.164. Particularizări ale acestor ecuații pentru blaz, talerul de alimentare, talerul N, condensatorul și tancul de distilat reies din ecuațiile II.4.165 – II.4.172.

În cadrul programului de simulare numerică în regim dinamic, drept valori staționare inițiale sunt utilizate valorile prezentate anterior pentru regimul staționar (fluxul de alimentare $F_A = 500$ kmol/h, fracția de masă a benzenului în acest flux $x_A = 0.45$ kmol/kmol, cifra de reflux $R = 2.5$, volatilitatea relativă $\alpha = 2.4$, numărul de talere $N = 10$, talerul de alimentare - talerul 5, debitul de distilat $F_D = 225$ kmol/h).

Precizăm, în continuare, valorile utilizate pentru alți parametri la simularea coloanei:

- suprafața secțiunii transversale – $S = 5.14$ m² ;
- rezistența hidraulică a talerelor – $r_h = 0.0005$ h;
- densitatea lichidului – $\rho = 880$ kg/m³
- masa molară - $M_{mol} = 78 \cdot x_i + 92 \cdot (1 - x_i)$;
- retenția de lichid pe talere în regim staționar - $M_s = 10$ kmoli ;

- retenția de lichid în blaz este considerată a fi constituită din două componente : retenția din fierbator - $M_{BF}=100$ kmoli ; retenția de lichid din blazul propriu-zis, dependentă de înălțimea lichidului, valoarea de regim staționar fiind $M_{BB}=40$ kmoli ;
- suprafața secțiunii transversale a tancului de distilat - $S_D=9$ m² ;
- înălțimea inițială a lichidului în tancul de distilat $H_{D0}=1$ m .

Având în vedere ipotezele luate în considerare la elaborarea modelului matematic, sistemele de reglare automată a temperaturilor în varful și în blazul coloanei (sisteme care de altfel au rolul de a stabiliza compoziția lichidului în blaz și în vârful) vor fi înlocuite cu sisteme de reglare ale compoziției în blaz și în tancul de distilați. Pentru toate cele patru sisteme se consideră că regulatoarele dezvoltă o acțiune de reglare de tip PI (K_p – coeficientul de transfer al regulatorului iar T_i – timpul acțiunii integrale) :

$$c(t) = K_p \cdot \left[\varepsilon(t) + \frac{1}{T_i} \int \varepsilon(t) \cdot dt \right] \quad (\text{II.4.183})$$

sau, în formă discretizată :

$$c(k+1) = c(k) - K_p \cdot \left[\varepsilon(k+1) - \varepsilon(k) + \frac{\Delta t}{T_i} \cdot \varepsilon(k+1) \right] \quad (\text{II.4.184})$$

În relația II.4.183, ε este eroarea de reglare:

$$\varepsilon = w - r \quad (\text{II.4.186})$$

iar w din relația II.4.186 este marimea de referință. La rândul ei, ea se evaluează pe baza valorii prescrise pentru parametrul reglat . În cazul referinței pentru nivelul în blaz de exemplu, relația de calcul este :

$$w_L = 4 + K_{TL} \cdot H_{PL} \quad (\text{II.4.187})$$

Debitele care trec prin ventilele de reglare a nivelului în blaz și în tancul de distilat se calculează în funcție de valoarea comenzii și înălțimea totală a lichidului :

$$F = [(c_L - 4) \cdot K_{EL}] \cdot \sqrt{H_0 + H} \quad (\text{II.4.188})$$

Pentru celelalte două sisteme de reglare (compoziția în blaz și în tancul de distilat), debitul prin ventile se calculează doar în funcție de valoarea comenzii și a coeficientului de debit al ventilului. Sistemul de reglare a compoziției în blaz acționează asupra debitului de vapori iar cel de reglare a compoziției distilatului, asupra debitului de reflux. În programul prezentat mai jos, indicii atașați mărimilor specifice celor 4 sisteme de reglare sunt aleși astfel încât semnificația lor este evidentă. Valorile staționare inițiale ale comenzilor sunt precizate prin indicele « 0 » atașat la finele variabilei care simbolizează comanda respectivă iar valorile prescrise pentru parametrii reglați au atașat indicele « p » (exemple cLB0, Hp0, etc.). Menționăm de asemenea că valorile comenzilor sunt limitate superior și inferior (maximum 20 mA și minimum 4 mA) iar contorizarea valorilor reținute în vederea reprezentărilor grafice se face cu un alt pas (dtauprint) decât cel de integrare pentru a nu exagera dimensiunile vectorilor.

Așa cum se poate constata din examinarea programului, simularea în regim dinamic pornește de la următoarele modificări față de situația de regim staționar :

- modificarea debitului de alimentare de la 500 la 600 kmoli/h ;
- fixarea valorii prescrise a regulatorului compoziției din blaz la $x_{Bp}=0.03$;
- fixarea valorii prescrise a regulatorului compoziției distilatului - $x_{Dp}=0.98$;

```
%          REGIM DINAMIC
V=FD*(R+1);FR=FD*R;x=xst;xB=xBst;xD=xDst;
S=5.14;ro=880;H=0;rhtaler=0.0005;MBB=40;MBF=110;MB=MBF+MBB;
tau=0;dtau=0.00025;tauprint=0;dtauprint=0.01;kprint=1;
tauf=2.5;
cLB0=6;cxB0=12;cxD0=8;cLD0=8;
MmolB=78*xB+92*(1-xB);MmolD=78*xD+92*(1-xD);
H0=MBB*MmolB/(S*ro);
Ms=15;Mx=Ms*x;MxB=MB*xB;
HD0=1;HD=0;
csup=20;cinf=4;

% Reglare nivel blaz - valori parametri.
cLB=cLB0;TiL=0.125;ktL=10;kpL=20;keL=48.6136;
Hp=0.8;
wL=4+ktL*Hp;rL=4+ktL*(H0+H);erregL=wL-rL;erregL1=0;

% Reglare compozitie blaz - valori parametri.
cxB=cxB0;TixB=0.2;kpXB=2;ktXB=160;keV=98.375;
xBp=0.03;
wxB=4+ktXB*xBp; rxB=4+ktXB*xB;erregxB1=0;

% Reglare compozitie distilat - valori parametri.
cxD=cxD0;TixD=0.2;kpXD=2;ktXD=160;keR=2*70.3125;
```

```
xDp=0.98;
wxD=4+ktxD*(xDp-0.9); rxD=4+ktxD*(xD-0.9);erregxD1=0;

% Reglare nivel tanc de distilat - valori parametri.
STancD=9;MD=STancD*(HD0+HD)*ro/MmolD;MxD=MD*xD;
cLD=cLD0;TiLD=0.125;ktLD=10;kpLD=20;keLD=56.25;
HpD=1;
wLD=4+ktLD*HpD;rLD=4+ktLD*(HD0+HD);erregLD=wLD-rLD;erregLD1=0;
Ms=15;M=15*ones(N,1);
FA=600;
while tau<=tauf
    if abs(tau-tauprint)<.00001
        vectau(kprint)=tauprint;
        vecxD(kprint)=xD;
        vecxB(kprint)=xB;
        vecH(kprint)=H0+H;
        vecHD(kprint)=HD0+HD;
        vecFD(kprint)=FD;
        vecFB(kprint)=FB;
        vecFR(kprint)=FR;
        vecV(kprint)=V;
        kprint=kprint+1;
        tauprint=tauprint+dtauprint;
    end;
    yB=echdist(xB);
    FB=(cLB-4)*keL*sqrt(H0+H);
    rL=4+ktL*(H0+H);
    erregL=wL-rL;
    cLB=cLB-kpL*(erregL-erregL1+dtau/TiL*erregL);
    if cLB>csup
        cLB=csup;
    elseif cLB<cinf
        cLB=cinf;
    else
        cLB=cLB;
    end;
    erregL1=erregL;

    V=(cxB-4)*keV;
    rxB=4+ktxB*xB;
    erregxB=wxB-rxB;
    cxB=cxB-kpB*(erregxB-erregxB1+dtau/TiB*erregxB);
    if cxB>csup
        cxB=csup;
    elseif cxB<cinf
        cxB=cinf;
    else
        cxB=cxB;
    end;
    erregxB1=erregxB;
```



```

FR=(cxD-4)*keR;
rxD=4+ktxD*(xD-0.9);
erregxD=wxD-rxD;
cxD=cxD+kpxD*(erregxD-erregxD1+dtau/TixD*erregxD);
if cxD>csup
    cxD=csup;
elseif cxD<cinf
    cxD=cinf;
else
    cxD=cxD;
end;
erregxD1=erregxD;

FD=(cLD-4)*keLD*sqrt(HD0+HD);
rLD=4+ktLD*(HD0+HD);
erregLD=wLD-rLD;
cLD=cLD-kpLD*(erregLD-erregLD1+dtau/TiLD*erregLD);
if cLD>csup
    cLD=csup;
elseif cLD<cinf
    cLD=cinf;
else
    cLD=cLD;
end;
erregLD1=erregLD;
for i=1:N
    if i<=na
        L(i)=FR+FA+(M(i)-Ms)/rhtaler;
    else
        L(i)=FR+(M(i)-Ms)/rhtaler;
    end;
    y(i)=echdist(x(i));
end;
MmolB=78*xB+92*(1-xB);MmolD=78*xD+92*(1-xD);
derMBB=L(1)-FB-V;
derMxB=L(1)*x(1)-V*yB-FB*xB;
derM(1)=L(2)-L(1);
derMx(1)=L(2)*x(2)-L(1)*x(1)+V*yB-V*y(1);
for i=2:na-1
    derM(i)=L(i+1)-L(i);
    derMx(i)=L(i+1)*x(i+1)-L(i)*x(i)+V*y(i-1)-V*y(i);
end;
derM(na)=L(na+1)-L(na)+FA;
derMx(na)=L(na+1)*x(na+1)-L(na)*x(na)+V*y(na-1)-
V*y(na)+FA*xA;
for i=na+1:N-1
    derM(i)=L(i+1)-L(i);
    derMx(i)=L(i+1)*x(i+1)-L(i)*x(i)+V*y(i-1)-V*y(i);
end;
derM(N)=FR-L(N);
derMx(N)=FR*xD-L(N)*x(N)+V*y(N-1)-V*y(N);

```

```

derMD=V-FR-FD;
derMxD=V*y(N)-(FR+FD)*xD;
MBB=MBB+derMBB*dtau;MB=MBB+MBF;
MxB=MxB+derMxB*dtau;
for i=1:N
    M(i)=M(i)+derM(i)*dtau;
    Mx(i)=Mx(i)+derMx(i)*dtau;
    x(i)=Mx(i)/M(i);
end;
MD=MD+derMD*dtau;
MxD=MxD+derMxD*dtau;
HD=MD*MmolD/(ro*STancD)-HD0;
H=MBB*MmolB/(S*ro)-H0;
xB=MxB/MB;
xD=MxD/MD;
tau=tau+dtau;
end;

```

Răspunsul coloanei la modificările efectuate asupra debitului de alimentare și asupra valorilor prescrise ale reguletoarelor este prezentat în figurile II.4.131 și II.4.132.

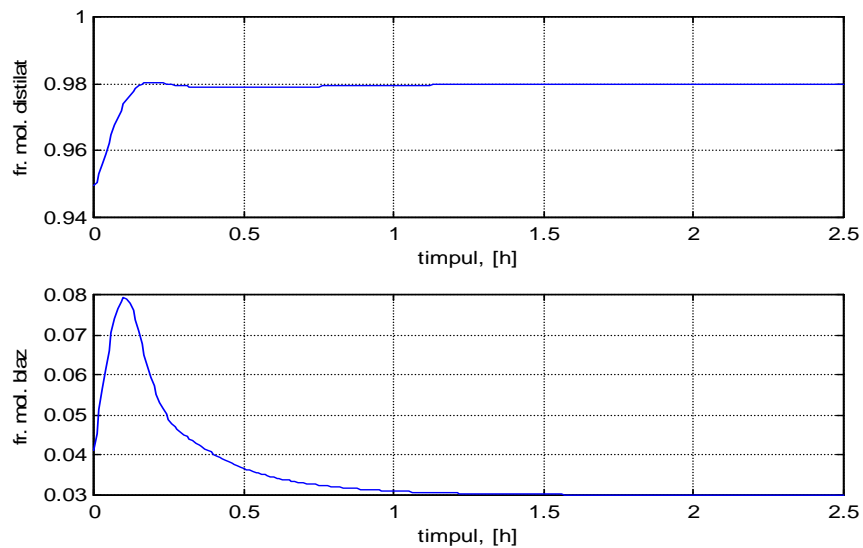


Figura II.4.131 Evoluția fracției molare a componentei volatile în distilat și în blaz (modificare debit de alimentare cu 100 kmoli/h, modificări referințe).

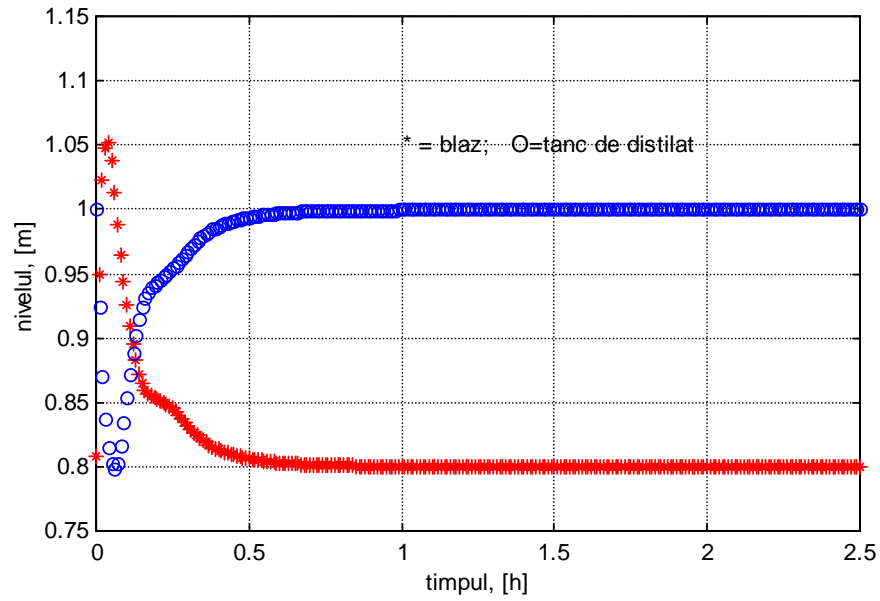


Figura II.4.132. Evoluția nivelului în blaz și în tancul de distilat (modificare debit de alimentare cu 100 kmoli/h)

Desigur, evoluția parametrilor menționați mai sus ar putea fi semnificativ diferită într-o coloana reală (în special în ceea ce privește compoziția, datorită eliminării practice a bilanțurilor termice pe baza presupunerilor făcute la modelare).

BIBLIOGRAFIE**Capitolul II:**

1. Astarita, G. : « Mass Transfer with Chemical Reaction », Elsevier, 1967.
2. Bozga, Gr. : « Conducerea cu calculatoare a proceselor chimice », Litografia Institutului Politehnic București, 1989.
3. Bozga, Gr., Postelnicu Paula, Plesu, V. : « Dinamica reactoarelor chimice », Litografia Universității « Politehnica » București, 1993.
4. Danckwerts, P.V. : « Gas-Liquid Reactions », Mc Graw-Hill, 1970.
5. Davis, M. : « Numerical Methods and Modeling for Chemical Engineers », John Wiley&Sons, 1984.
6. Franks, R. : « Modelarea și simularea în Ingineria Chimică », Editura Tehnică, București, 1979.
7. Froment, G.F., Bischoff, K.B. : « Chemical Reactor Analysis and Design », John Wiley&Sons, 1968.
8. Himmelblau, D.M., Bischoff, K.B. : « Process Analysis and Simulation : Deterministic Systems », John Wiley&Sons, 1968.
9. Ingham, J., Dunn, I., Heinzle, E., Prenosil, J. : « Chemical Engineering Dynamics », VCH, 1994.
10. Kastanek, F., Zahradnik, J., Kratochvil, J., Cermak, J. : « Chemical Reactors for Gas-Liquid Systems », Ellis Horwood, 1993.
11. Levenspiel, O. : « Chemical Reaction Engineering », John Wiley&Sons, 1972
12. Luyben, W. : « Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers », McGraw – Hill, 1986.
13. Mihail, R. : « Modelarea reactoarelor chimice », Editura Tehnică, București, 1976.
14. Mihail, R., Muntean, O. : « Reactoare chimice », Editura Didactică și Pedagogică, București, 1983
15. Penny, J., Lindfield, G. : « Numerical Methods Using MATLAB », Ellis Horwood, 1995.
16. Rice, R., Do D. : « Applied Mathematics and Modeling for Chemical Engineers », John Wiley&Sons, 1995.
17. Richardson, J.F., Peacock, D.K. : « Coulson&Richardson's Chemical Engineering », vol. 3, Pergamon, 1994.
18. Todinca, T., Perju Delia, Suta, M. : « Optimizări în industria chimică », vol. I, Editura Mirton, Timișoara, 1993.
19. Villiermaux, J. : « Genie de la reaction chimique – conception et fonctionnement des reacteurs », TEC&DOC – Lavoisier, 1993.

Paragraful II.4.8

20. Astarita, G., Savage, D., Bisio, A. : « Gas Treating with Chemical Solvents », John Wiley&Sons, 1983.
21. Gianetto A., Silverston P.L. "Multiphase Chemical Reactors: Theory, Design and Scale-up", Hemisphere Publ. Corp., 1986, Whashington
22. Todinca, T., Moszkowicz, P., Târnoveanu, M., Bennada B. : « The Estimation of the Promoter Effect on the Absorption of CO₂ in Diethanolamine Promoted Hot Potassium Carbonate Processes", Dist.-Abs. Conference, Maastricht, 1997, vol.I, pag. 429-437.