



Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο
Τμήμα Χημικών Μηχανικών
Τομέας II : Ανάλυσης, Σχεδιασμού και Ανάπτυξης
Διεργασιών και Συστημάτων

Ανάπτυξη στατικού προτύπου επίλυσης προβλημάτων
αξιολόγησης αποστακτικών στηλών.

Διπλωματική Εργασία

Κόκκορης Γιώργος

Επίβλεψη :
Λυγερός Α. Ι.
Αναπληρωτής Καθηγητής

ΑΘΗΝΑ 1998



Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο
Τμήμα Χημικών Μηχανικών
Τομέας II : Ανάλυσης, Σχεδιασμού και Ανάπτυξης
Διεργασιών και Συστημάτων

Ανάπτυξη στατικού προτύπου επίλυσης προβλημάτων
αξιολόγησης αποστακτικών στηλών.

Διπλωματική Εργασία

Κόκκορης Γιώργος

Επίβλεψη :
Λυγερός Α. Ι.
Αναπληρωτής Καθηγητής

ΑΘΗΝΑ 1998

Ευχαριστίες

Θα ήθελα να εκφράσω τις ειλικρινείς ευχαριστίες μου σε όλους όσους βοήθησαν καθ' οιονδήποτε τρόπο στην εκπόνηση αυτής της διπλωματικής εργασίας.

Ιδιαίτερα θα ήθελα να ευχαριστήσω τον Αναπληρωτή Καθηγητή του ΕΜΠ κ. Αργύρη Λυγερό που μου έδωσε τη δυνατότητα να πραγματοποιήσω τη διπλωματική εργασία και μου παρείχε πολύτιμες συμβουλές και την απαραίτητη βιβλιογραφία κατά τη διάρκειά της. Επίσης, θα ήθελα να ευχαριστήσω τον Αναπληρωτή Καθηγητή κ. Ζαχαρία Μαρούλη και τον Επίκουρο Καθηγητή κ. Κωστή Μαγουλά για τον πολύτιμο χρόνο που μου αφιέρωσαν. Η φιλοξενία της υπολογιστικής μονάδας του κ. Αργύρη Λυγερού και των υποψήφιων διδασκτόρων κ. Γιάννη Κούκου και κ. Γιάννη Παπαγεωργακόπουλου είναι σίγουρα άξια λόγου.

Τέλος, θα ήθελα να ευχαριστήσω όλους όσους συμπαραστάθηκαν στην προσπάθεια μου, και ειδικά την οικογένειά μου, στην οποία και αφιερώνεται η παρούσα εργασία.

Περιεχόμενα

Περιεχόμενα.....	i
Κατάλογος σχημάτων.....	v
Κατάλογος πινάκων.....	ix
Κατάλογος συμβόλων.....	xi
Συντομογραφίες.....	xvii
Περίληψη.....	xix
Κεφάλαιο 1 : Εισαγωγή.....	1
1.1 Σκοπός της εργασίας.....	2
1.2 Συνοπτική παρουσίαση.....	3
1.3 Σχόλια.....	4
Κεφάλαιο 2 : Βασικές έννοιες ανάπτυξης μαθηματικών προτύπων.....	5
2.1 Το μαθηματικό πρότυπο.....	6
2.2 Βαθμοί ελευθερίας.....	7
2.3 Είδη προβλημάτων.....	8
Κεφάλαιο 3 : Ορισμός και βασικές έννοιες της απόσταξης.....	11
3.1 Απόσταξη και αποστακτική στήλη.....	12
3.1.1 Η θέση της απόσταξης στην ιεραρχία των διαχωρισμών.....	12
3.1.2 Η αποστακτική στήλη.....	15
3.2 Βασικές έννοιες απόσταξης.....	18
3.2.1 Η έννοια της ισορροπίας ατμών-υγρού.....	18
3.2.2 Λόγοι ισορροπίας : η ποσοτική περιγραφή της ισορροπίας.....	19
3.2.3 Η σχετική πτητικότητα.....	22
Κεφάλαιο 4 : Πρότυπα επίλυσης για τα προβλήματα διαχωρισμού πολυσυστατικών μιγμάτων σε αποστακτική στήλη.....	23
4.1 Καθορισμός του προβλήματος.....	24
4.2 Ταξινόμηση των μεθόδων.....	24
4.3 Απλοποιημένες μέθοδοι.....	25
4.3.1 Εμπειρικές μέθοδοι.....	25
4.3.2 Μέθοδοι ομάδων.....	29
4.3.3 Γραφικές μέθοδοι.....	32
4.4 Αναλυτικές μέθοδοι.....	32
Κεφάλαιο 5 : Η ανάπτυξη της απλοποιημένης μεθόδου.....	37
5.1 Απλοποιητικές παραδοχές.....	38
5.1.1 Η παραδοχή σταθερής γραμμομοριακής ροής.....	38

5.1.2 Η παραδοχή σταθερών σχετικών πτητικότητων.....	41
5.1.3 Η παραδοχή σταθερής πίεσης στην αποστακτική στήλη.....	42
5.1.4 Η παραδοχή ανάμιξης του ρεύματος τροφοδοσίας με τα ρευστά της βαθμίδας τροφοδοσίας πριν από οποιοδήποτε διαχωρισμό.....	42
5.1.5 Η παραδοχή κορεσμένων ροών.....	43
5.2 Ισοζύγια μάζας.....	43
5.2.1 Συμβολισμοί.....	43
5.2.2 Ισοζύγια μάζας στο τμήμα εξάντλησης.....	44
5.2.3 Ισοζύγια μάζας στο τμήμα εμπλουτισμού.....	49
5.2.4 Ισοζύγιο μάζας στη βαθμίδα τροφοδοσίας.....	54
5.3 Εξαγωγή της απλοποιημένης εξίσωσης.....	54
5.4 Εφαρμογές - Παρατηρήσεις.....	57
Κεφάλαιο 6 : Το μαθηματικό πρότυπο της διεργασίας.....	61
6.1 Η διεργασία.....	62
6.2 Παραδοχές προσέγγισης της διεργασίας.....	62
6.3 Μαθηματικό πρότυπο της διεργασίας.....	62
6.4 Βαθμοί ελευθερίας της διεργασίας.....	69
6.5 Εναλλακτικά προβλήματα.....	70
6.6 Διαδικασία επίλυσης.....	72
Κεφάλαιο 7 : Τα αποτελέσματα των υπολογισμών.....	75
7.1 Το πρόγραμμα.....	76
7.2 Η ακρίβεια των αποτελεσμάτων του προγράμματος.....	76
7.3 Σύγκριση αποτελεσμάτων απλοποιημένου-αναλυτικού προτύπου.....	77
7.4 Ανάλυση ευαισθησίας των αποτελεσμάτων.....	82
Κεφάλαιο 8 : Παρουσίαση του προγράμματος.....	87
8.1 Δυνατότητες του προγράμματος.....	88
8.2 Τρόπος χρήσης του προγράμματος.....	89
Κεφάλαιο 9 : Συμπεράσματα και προτάσεις.....	99
9.1 Συμπεράσματα.....	100
9.2 Προτάσεις.....	101
Βιβλιογραφία.....	103
Παραρτήματα.....	107
Παράρτημα 1 : Απόδειξη της απλοποιημένης σχέσης υπολογισμού της σύστασης του υγρού ρεύματος που αφήνει τη βαθμίδα m του τμήματος εξάντλησης.....	109
Παράρτημα 2 : Τρόπος απόδειξης της απλοποιημένης σχέσης υπολογισμού των ανακτήσεων των συστατικών στο υπόλειμμα.....	113
Παράρτημα 3 : Τρόπος υπολογισμού των λόγων ισορροπίας και των ειδικών ενθαλπιών..	117
Παράρτημα 4 : Ο αλγόριθμος επίλυσης.....	123

Παράρτημα 5 : Μέθοδοι σύγκλισης.....	127
Παράρτημα 6 : Αποτελέσματα, συγκρίσεις αποτελεσμάτων και ανάλυση ευαισθησίας για 8 παραδείγματα.....	131
Παράρτημα 7 : Ο κώδικας του προγράμματος.....	167

Κατάλογος σχημάτων

σελίδα 8 :

Σχήμα 2-1 : Συνοπτικό διάγραμμα ροής πληροφοριών του μαθηματικού προτύπου.

σελίδα 8 :

Σχήμα 2-2 : Γενικευμένη απεικόνιση διεργασίας.

σελίδα 12 :

Σχήμα 3-1 : Απλοποιημένο διάγραμμα ροής διεργασίας διαχωρισμού.

σελίδα 14 :

Σχήμα 3-2 : Ταξινόμηση διαχωρισμών.

σελίδα 16 :

Σχήμα 3-3 : Τυπική αποστακτική στήλη.

σελίδα 17 :

Σχήμα 3-4 : Διάτρητος δίσκος.

σελίδα 26 :

Σχήμα 4-1 : Αποστακτική στήλη με μερικό αναβραστήρα και ολικό συμπυκνωτήρα.

σελίδα 29 :

Σχήμα 4-2 : Διάγραμμα Gilliland.

σελίδα 30 :

Σχήμα 4-3 : Αποστακτική στήλη με μερικό αναβραστήρα και ολικό συμπυκνωτήρα.

σελίδα 33 :

Σχήμα 4-4 : Σχηματική απεικόνιση βαθμίδας ισορροπίας.

σελίδα 38 :

Σχήμα 5-1 : Τυπική βαθμίδα στο τμήμα εμπλουτισμού αποστακτικής στήλης.

σελίδα 39 :

Σχήμα 5-2 : Κορυφή αποστακτικής στήλης με ολικό συμπυκνωτήρα.

σελίδα 43 :

Σχήμα 5-3 : Αποστακτική στήλη με μερικό αναβραστήρα και ολικό συμπυκνωτήρα.

σελίδα 44 :

Σχήμα 5-4 : Τυπική βαθμίδα στο τμήμα εξάντλησης αποστακτικής στήλης.

σελίδα 45 :

Σχήμα 5-5 : Η πρώτη βαθμίδα της αποστακτικής στήλης όταν ο αναβραστήρας είναι ολικός.

σελίδα 46 :

Σχήμα 5-6 : Οι βαθμίδες 1 και 2 της αποστακτικής στήλης όταν ο αναβραστήρας είναι μερικός.

σελίδα 49 :

Σχήμα 5-7 : Τυπική βαθμίδα στο τμήμα εμπλουτισμού αποστακτικής στήλης.

σελίδα 50 :

Σχήμα 5-8 : Η βαθμίδα N της αποστακτικής στήλης όταν ο συμπυκνωτήρας είναι ολικός.

σελίδα 51 :

Σχήμα 5-9 : Οι βαθμίδες N-1 και N της αποστακτικής στήλης όταν ο συμπυκνωτήρας είναι μερικός.

σελίδα 54 :

Σχήμα 5-10 : Βαθμίδα τροφοδοσίας αποστακτικής στήλης.

σελίδα 55 :

Σχήμα 5-11 : Τμήμα εξάντλησης της αποστακτικής στήλης (ο αναβραστήρας είναι μερικός).

σελίδα 68 :

Σχήμα 6-1 : Τυπική αποστακτική στήλη.

σελίδα 79 :

Σχήμα 7-1 : Γραμμομοριακά κλάσματα στο υπόλειμμα με βάση την αναλυτική και την απλοποιημένη μέθοδο για το παράδειγμα 1.

σελίδα 80 :

Σχήμα 7-2 : Κατανομή θερμοκρασίας εντός της αποστακτικής στήλης με βάση την απλοποιημένη και την αναλυτική μέθοδο για το παράδειγμα 1.

σελίδα 81 :

Σχήμα 7-3 : Μεταβολή του λόγου γραμμομοριακής ροής υγρού προς γραμμομοριακή ροή ατμών εντός της στήλης για το παράδειγμα 1.

σελίδα 89 :

Σχήμα 8-1 : Το περιβάλλον επικοινωνίας χρήστη-προγράμματος.

σελίδα 90 :

Σχήμα 8-2 : Το παράθυρο διαλόγου για τον καθορισμό των παραμέτρων λειτουργίας της αποστακτικής στήλης.

σελίδα 91 :

Σχήμα 8-3 : Το παράθυρο διαλόγου για τον καθορισμό των συστατικών και της σύστασης του ρεύματος τροφοδοσίας της αποστακτικής στήλης.

σελίδα 91 :

Σχήμα 8-4 : Τα αποτελέσματα των υπολογισμών για το παράδειγμα 1 πάνω σε σχήμα αποστακτικής στήλης.

σελίδα 92 :

Σχήμα 8-5 : Το παράθυρο διαλόγου για την επιλογή διαγράμματος απεικόνισης αποτελεσμάτων.

σελίδα 92 :

Σχήμα 8-6 : Γραφική απεικόνιση της κατανομής θερμοκρασίας εντός της στήλης για το παράδειγμα 1.

σελίδα 93 :

Σχήμα 8-7 : Ανακτήσεις συστατικών για το παράδειγμα 1.

σελίδα 93 :

Σχήμα 8-8 : Γραμμομοριακά κλάσματα στο ρεύμα τροφοδοσίας, στο απόσταγμα και στο υπόλειμμα για το παράδειγμα 1.

σελίδα 94 :

Σχήμα 8-9 : Κατανομή σύστασης της υγρής φάσης στο εσωτερικό της στήλης για το παράδειγμα 1.

σελίδα 94 :

Σχήμα 8-10 : Το παράθυρο διαλόγου για την επιλογή της ανεξάρτητα μεταβαλλόμενης παραμέτρου, των ορίων και των βημάτων μεταβολής της.

σελίδα 95 :

Σχήμα 8-11 : Το παράθυρο διαλόγου για την επιλογή της εξαρτημένης παραμέτρου.

σελίδα 95 :

Σχήμα 8-12 : Γραφική απεικόνιση της μεταβολής των θερμοκρασιών αποστάγματος, υπολείμματος, και της βαθμίδας 13 ως συνάρτηση της παροχής αποστάγματος, για το παράδειγμα 1.

σελίδα 96 :

Σχήμα 8-13 : Γραφική απεικόνιση της μεταβολής των γραμμομοριακών κλασμάτων στο απόσταγμα και στη βαθμίδα 10 ως συνάρτηση της παροχής αποστάγματος, για το παράδειγμα 1.

σελίδα 97 :

Σχήμα 8-14 : Γραφική απεικόνιση της μεταβολής του γραμμομοριακού κλάσματος του ισοβουτανίου στο υπόλειμμα ως συνάρτηση της παροχής αποστάγματος, για το παράδειγμα 1.

σελίδα 97 :

Σχήμα 8-15 : Γραφική απεικόνιση της μεταβολής του γραμμομοριακού κλάσματος του κ-βουτανίου στο απόσταγμα ως συνάρτηση της θέσης της βαθμίδας τροφοδοσίας, για το παράδειγμα 1.

Κατάλογος πινάκων

σελίδα 63 :

Πίνακας 6-1 : Πρώτο σύνολο εξισώσεων του μαθηματικού προτύπου.

σελίδα 65 :

Πίνακας 6-2 : Δεύτερο σύνολο εξισώσεων του μαθηματικού προτύπου.

σελίδα 65 :

Πίνακας 6-3 : Τρίτο σύνολο εξισώσεων του μαθηματικού προτύπου.

σελίδα 69 :

Πίνακας 6-4 : Βαθμοί ελευθερίας με βάση τον περιγραφικό κανόνα της διεργασίας που περιγράφεται στην παράγραφο 6.1. C είναι ο αριθμός συστατικών του μίγματος.

σελίδα 78 :

Πίνακας 7.1 : Γραμμομοριακά κλάσματα των συστατικών του μίγματος τροφοδοσίας του παραδείγματος 1.

σελίδα 79 :

Πίνακας 7-2 : Γραμμομοριακά κλάσματα υπολείμματος και αποστάγματος με βάση την απλοποιημένη και την αναλυτική μέθοδο και η μεταξύ τους απόκλιση για το παράδειγμα 1.

σελίδα 80 :

Πίνακας 7-3 : Θερμοκρασία σε κάθε βαθμίδα της αποστακτικής στήλης με βάση την απλοποιημένη και την αναλυτική μέθοδο και η μεταξύ τους απόκλιση για το παράδειγμα 1.

σελίδα 81 :

Πίνακας 7-4 : Συγκεντρωτικός πίνακας σύγκρισης αποτελεσμάτων απλοποιημένου και αναλυτικού προτύπου για κάθε παράδειγμα που εξετάστηκε.

σελίδα 82 :

Πίνακας 7-5 : Μεταβολή των λόγων ισορροπίας με τη θερμοκρασία σε κάθε βαθμίδα για το παράδειγμα 1, όπως αυτή προβλέπεται από τη συσχέτιση McWilliams.

σελίδα 83 :

Πίνακας 7-6 : Μεταβολή της σύστασης του υπολείμματος σε σχέση με την %απόκλιση των λόγων ισορροπίας από τους υπολογιζόμενους με την εξίσωση McWilliams. Τα αποτελέσματα αναφέρονται στο παράδειγμα 1.

σελίδα 83 :

Πίνακας 7-7 : Μεταβολή της σύστασης του αποστάγματος σε σχέση με την %απόκλιση των λόγων ισορροπίας από τους υπολογιζόμενους με την εξίσωση McWilliams. Τα αποτελέσματα αναφέρονται στο παράδειγμα 1.

σελίδα 84 :

Πίνακας 7-8 : Μεταβολή της θερμοκρασίας (K) σε κάθε βαθμίδα σε σχέση με την %απόκλιση των λόγων ισορροπίας από τους υπολογιζόμενους με την εξίσωση McWilliams. Τα αποτελέσματα αναφέρονται στο παράδειγμα 1.

Κατάλογος συμβόλων

- $A_{k,i}$: σταθερές της εξίσωσης Antoine για τον υπολογισμό της τάσης ατμών του συστατικού i ($k=1,2,3$). Φαίνονται στον πίνακα Π3-3.
- B : η γραμμομοριακή παροχή του υπολείμματος (kmol/h).
- C : ο αριθμός των συστατικών του μίγματος ή του συστήματος.
- $C_{k,i}$: σταθερές στη σχέση υπολογισμού της γραμμομοριακής ειδικής θερμότητας ιδανικού αερίου, που αντιστοιχεί στο καθαρό συστατικό i ($k=1,2,\dots,5$). Φαίνονται στον πίνακα Π3-2.
- $C_{p,v,i}^{\circ}$: γραμμομοριακή ειδική θερμότητα του συστατικού i , αν αυτό θεωρηθεί ιδανικό αέριο $\left(\frac{kJ}{kmole\ K}\right)$.
- D : η γραμμομοριακή παροχή του αποστάγματος (kmol/h).
- E_1 : συντελεστής μετατροπής μονάδων ίσος με $(1/3600)$ h/sec.
- F : η γραμμομοριακή παροχή του ρεύματος τροφοδοσίας (kmol/h). Στην εξίσωση (3-1) εκφράζει τους βαθμούς ελευθερίας ενός συστήματος στην ισορροπία.
- F_j : η γραμμομοριακή παροχή του ρεύματος τροφοδοσίας της βαθμίδας j (kmol/h).
- f_i : η ανάκτηση του συστατικού i στο υπόλειμμα [εξίσωση (4-11)].
- f_i° : η τάση διαφυγής πρότυπης κατάστασης του συστατικού i .
- \hat{f}_i^V : η τάση διαφυγής του συστατικού i του συστήματος στην αέρια φάση.
- \hat{f}_i^L : η τάση διαφυγής του συστατικού i του συστήματος στην υγρή φάση.
- h_{Fj} : η ειδική ενθαλπία του μίγματος τροφοδοσίας της βαθμίδας j .
- h_i : παράμετρος χωρίς φυσικό νόημα των εξισώσεων (4-11) και (5-46) που αντιστοιχεί στο συστατικό i .
- h_{Lj} : η ειδική ενθαλπία του υγρού μίγματος που αφήνει τη βαθμίδα j .
- $h_L(x_i, T)$: η γραμμομοριακή ενθαλπία (kJ/kmole) υγρού μίγματος με σύσταση x_i , σε θερμοκρασία T (K).
- h_{Vj} : η ειδική ενθαλπία του μίγματος ατμών που αφήνει τη βαθμίδα j .
- $h_V(y_i, T)$: η γραμμομοριακή ενθαλπία (kJ/kmole) αερίου μίγματος με σύσταση y_i , σε θερμοκρασία T (K).
- $h_{Vi}^{\circ}(T)$: η γραμμομοριακή ενθαλπία (kJ/kmole) του καθαρού συστατικού i στη θερμοκρασία T (K).

- K_i : ο φαινόμενος λόγος ισορροπίας του συστατικού i στο τμήμα εμπλουτισμού. Στις εξισώσεις (3-6), (3-9), (3-11), (3-14), (3-20) είναι ο λόγος ισορροπίας του συστατικού i του μίγματος.
- \bar{K}_i : ο φαινόμενος λόγος ισορροπίας του συστατικού i στο τμήμα εξάντλησης.
- $K_{i,j}$: ο λόγος ισορροπίας του συστατικού i στη βαθμίδα j
- $K_{i,M+1}$: ο λόγος ισορροπίας του συστατικού i στη βαθμίδα τροφοδοσίας ($M+1$). Υπολογίζεται στη θερμοκρασία της ζώνης τροφοδοσίας.
- $K_i(P, T)$: ο λόγος ισορροπίας του συστατικού i σε πίεση P (kPa) και θερμοκρασία T (K).
-
- L : η γραμμομοριακή παροχή υγρού στο τμήμα εμπλουτισμού (kmoles/h).
- \bar{L} : η γραμμομοριακή παροχή υγρού στο τμήμα εξάντλησης (kmoles/h).
- L_k : η γραμμομοριακή παροχή υγρού που αφήνει τη βαθμίδα k (kmoles/h) στο τμήμα εμπλουτισμού. Στις εξισώσεις (4-18) και (4-22) είναι η γραμμομοριακή παροχή υγρού που αφήνει τη βαθμίδα k .
- \bar{L}_k : η γραμμομοριακή παροχή υγρού που αφήνει τη βαθμίδα k στο τμήμα εξάντλησης (kmoles/h).
- L_{N+1} : η παροχή της αναρροής στην αποστακτική στήλη, όταν ο συμπυκνωτήρας είναι ολικός (kmoles/h).
-
- M : ο αριθμός των θεωρητικών βαθμίδων κάτω από τη βαθμίδα τροφοδοσίας (περιλαμβάνει και μερικό αναβραστήρα). Στις εξισώσεις (2-1), (6-1), (6-3) εκφράζει τις μεταβλητές ενός συστήματος εξισώσεων.
- m : αύξων αριθμός θεωρητικής βαθμίδας στο τμήμα εξάντλησης (κυμαίνεται από 2 έως M).
-
- N : ο αριθμός των θεωρητικών βαθμίδων της αποστακτικής στήλης. Περιλαμβάνει μερικό αναβραστήρα και μερικό συμπυκνωτήρα. Στην εξίσωση (4-11) στο N δεν περιλαμβάνεται ο μερικός συμπυκνωτήρας.
- n : αύξων αριθμός θεωρητικής βαθμίδας στο τμήμα εμπλουτισμού (κυμαίνεται από $M+1$ έως $N-1$).
- N_{\min} : ο ελάχιστος αριθμός θεωρητικών βαθμίδων.
-
- P : η πίεση λειτουργίας της αποστακτικής στήλης (atm), εκτός από την εξίσωση (3-1), όπου εκφράζει τον αριθμό των φάσεων του συστήματος και τις εξισώσεις (3-7), (3-9), (3-10), (3-12), (3-13), (3-15), (3-16), (3-17), όπου εκφράζει την ολική πίεση του συστήματος. Στην εξίσωση (Π3-1) οι μονάδες της είναι kPa.
- P_{Fj} : η πίεση του ρεύματος τροφοδοσίας της βαθμίδας j .
- P_i : η μερική πίεση του συστατικού i .
- P_i^S : η τάση ατμών του καθαρού συστατικού i στη θερμοκρασία του μίγματος (atm).
- P_j : η πίεση στη βαθμίδα j .

- q : η θερμική κατάσταση της τροφοδοσίας.
 Q_c : το φορτίο του συμπυκνωτήρα (kW).
 Q_j : η θερμότητα που απομακρύνεται από τη βαθμίδα j.
 Q_r : το φορτίο του αναβραστήρα (kW).
- R : ο (εξωτερικός) λόγος αναρροής της αποστακτικής στήλης.
 $\Gamma_{\beta k,D}$: η ανάκτηση του βαριού κλειδιού στο απόσταγμα.
 $\Gamma_{\beta k,B}$: η ανάκτηση του βαριού κλειδιού στο υπόλειμμα.
 $\Gamma_{\epsilon k,B}$: η ανάκτηση του ελαφρού κλειδιού στο υπόλειμμα.
 $\Gamma_{\epsilon k,D}$: η ανάκτηση του ελαφρού κλειδιού στο απόσταγμα.
 R_g : παγκόσμια σταθερά των αερίων ίση με $8.3144 \left(\frac{\text{kJ}}{\text{kmole K}} \right)$.
 $\Gamma_{i,B}$: η ανάκτηση του συστατικού i στο υπόλειμμα.
 R_{\min} : ο ελάχιστος λόγος αναρροής.
- $S_{n,i}$: ο παράγοντας εξάντλησης του συστατικού i στο τμήμα εμπλουτισμού.
 $S_{m,i}$: ο παράγοντας εξάντλησης του συστατικού i στο τμήμα εξάντλησης.
- T : η θερμοκρασία σε K.
 T_0 : η θερμοκρασία του μίγματος ατμών που αφήνει τον αναβραστήρα όταν αυτός είναι ολικός (K).
 T_{Fj} : η θερμοκρασία του ρεύματος τροφοδοσίας της βαθμίδας j.
 T_{FZ} : η θερμοκρασία της ζώνης τροφοδοσίας της αποστακτικής στήλης (K).
 T_D : η θερμοκρασία του αποστάγματος (K).
 T_k : η θερμοκρασία της βαθμίδας k της αποστακτικής στήλης (K).
 T_n : η αριθμητική μέση θερμοκρασία του τμήματος εμπλουτισμού (K).
 $T_{n,\varphi}$: η φαινόμενη θερμοκρασία του τμήματος εμπλουτισμού που υπολογίζεται ως η αριθμητική μέση θερμοκρασία του τμήματος εμπλουτισμού (K).
 T_m : η αριθμητική μέση θερμοκρασία του τμήματος εξάντλησης (K).
 $T_{m,\varphi}$: η φαινόμενη θερμοκρασία του τμήματος εξάντλησης που υπολογίζεται ως η αριθμητική μέση θερμοκρασία του τμήματος εξάντλησης (K).
 T_{ref} : θερμοκρασία αναφοράς, στην οποία η ενθαλπία ιδανικού αερίου είναι μηδενική (K). Θεωρούμε ότι $T_{\text{ref}} = 273 \text{ K}$.
- U_j : η γραμμομοριακή παροχή υγρού πλάγιου προϊόντος από τη βαθμίδα j (kmol/h).
- \bar{V} : η γραμμομοριακή παροχή ατμών στο τμήμα εμπλουτισμού (kmol/h).
 \bar{V} : η γραμμομοριακή παροχή ατμών στο τμήμα εξάντλησης (kmol/h).

- V_k : η γραμμομοριακή παροχή ατμών που αφήνει τη βαθμίδα k στο τμήμα εμπλουτισμού(kmoles/h). Στις εξισώσεις (4-18) και (4-22) είναι η γραμμομοριακή παροχή ατμών που αφήνει τη βαθμίδα k .
- \bar{V}_k : η γραμμομοριακή παροχή ατμών που αφήνει τη βαθμίδα k στο τμήμα εξάντλησης (kmoles/h).
- W_j : η γραμμομοριακή παροχή ατμών πλάγιου προϊόντος από τη βαθμίδα j (kmoles/h).
- X : η τετμημένη του διαγράμματος Gilliland.
- $X_{\beta k,D}$: το γραμμομοριακό κλάσμα του βαριού κλειδιού στο απόσταγμα.
- $X_{\beta k,B}$: το γραμμομοριακό κλάσμα του βαριού κλειδιού στο υπόλειμμα.
- $X_{\epsilon k,D}$: το γραμμομοριακό κλάσμα του ελαφρού κλειδιού στο απόσταγμα.
- $X_{\epsilon k,B}$: το γραμμομοριακό κλάσμα του ελαφρού κλειδιού στο υπόλειμμα.
- X_i : το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στην υγρή φάση.
- $X_{i,D}$: το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στο απόσταγμα.
- $X_{i,B}$: το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στο υπόλειμμα.
- $X_{i,j}$: το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στο υγρό ρεύμα που αφήνει τη βαθμίδα j .
- $X_{i,m}$: το γραμμομοριακό κλάσμα στην υγρή φάση του συστατικού i στη βαθμίδα m (η οποία βρίσκεται στο τμήμα εξάντλησης).
- $X_{i,n}$: το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στην υγρή φάση στη βαθμίδα n (η οποία βρίσκεται στο τμήμα εμπλουτισμού).
- Y : η τεταγμένη του διαγράμματος Gilliland.
- y_i : το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στην αέρια φάση.
- $y_{i,0}$: το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στο ρεύμα ατμών που αφήνει τον ολικό αναβραστήρα.
- $y_{i,j}$: το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στο ρεύμα ατμών που αφήνει τη βαθμίδα j .
- Z_i : το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στο ρεύμα τροφοδοσίας.
- $Z_{i,j}$: το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στο ρεύμα τροφοδοσίας της βαθμίδας j .

Ελληνικοί χαρακτήρες

- $\alpha_{\epsilon\beta k}$: μέση σχετική πτητικότητα του ελαφρού προς το βαρύ συστατικό κλειδί. Συνήθως υπολογίζεται ως ο γεωμετρικός μέσος των αντίστοιχων τιμών για το απόσταγμα και το υπόλειμμα.
- α_{ij} : η σχετική πτητικότητα του συστατικού i προς το συστατικό j .

- $\alpha_{k,i}$: συντελεστές στη σχέση υπολογισμού των λόγων ισορροπίας (McWilliams), χαρακτηριστικοί για το συστατικό i . Φαίνονται στον πίνακα Π3-1 ($k=1,2,3$).
- $\beta_{k,i}$: συντελεστές στη σχέση υπολογισμού των λόγων ισορροπίας (McWilliams), χαρακτηριστικοί για το συστατικό i . Φαίνονται στον πίνακα Π3-1 ($k=1,2,3$).
- γ_i : ο συντελεστής ενεργότητας του συστατικού i στην υγρή φάση.
- θ : παράμετρος των εξισώσεων Underwood.
- λ_i : γραμμομοριακή λανθάνουσα θερμότητα εξάτμισης του καθαρού συστατικού i (kJ/kmole).
- Φ_i^L : ο συντελεστής τάσης διαφυγής του καθαρού συστατικού i στην υγρή φάση.
- $\hat{\Phi}_i^V$: ο συντελεστής τάσης διαφυγής του συστατικού i στην αέρια φάση.
- $\hat{\Phi}_i^L$: ο συντελεστής τάσης διαφυγής του συστατικού i στην υγρή φάση.

Συντομογραφίες

- αν : αναλυτική μέθοδος.
απ : απλοποιημένη μέθοδος.
ΜΕΣ.Α : ο ΜΕΣος όρος των απόλυτων τιμών ενός συνόλου Αποκλίσεων.
ΜΕΓ.Α : η ΜΕΓιστη απόκλιση των απόλυτων τιμών ενός συνόλου Αποκλίσεων.
ΟΜΕΣ.Α : Ολική ΜΕΣη Απόκλιση.
- ΒΕ : οι Βαθμοί Ελευθερίας μιας διεργασίας.
ΜΕ : οι Μεταβλητές Επίλυσης των εξισώσεων ενός μαθηματικού προτύπου.
Ε : οι Εξισώσεις ενός μαθηματικού προτύπου.
- ΕΚ ή εκ : το Ελαφρό συστατικό Κλειδί ενός προς διαχωρισμό μίγματος.
ΒΚ ή βκ : το Βαρύ συστατικό Κλειδί ενός προς διαχωρισμό μίγματος.
ΜΚ : Μη Κλειδί, δηλαδή το συστατικό ενός προς διαχωρισμό μίγματος που δεν είναι κλειδί.
ΕΜΚ : Ελαφρό Μη Κλειδί συστατικό ενός προς διαχωρισμό μίγματος.
ΒΜΚ : Βαρύ Μη Κλειδί συστατικό ενός προς διαχωρισμό μίγματος.
- FUG : η μέθοδος Fenske-Underwood-Gilliland.
SB : η μέθοδος Smith-Brinkley.
PSRK : το μοντέλο Predictive Soave Redlich Kwong περιγραφής της ισορροπίας και των θερμοδυναμικών ιδιοτήτων ενός μίγματος.

Περίληψη

Η απόσταξη λόγω του κρίσιμου ρόλου της στη χημική βιομηχανία έχει ευρέως μελετηθεί και αποτελεί βασικό κεφάλαιο σε κάθε βιβλίο διεργασιών διαχωρισμού. Ένα πλήθος προτύπων περιγραφής της είναι διαθέσιμο στη βιβλιογραφία. Τα πρότυπα είναι είτε απλοποιημένα-προσεγγιστικά, είτε αναλυτικά-ακριβή. Η ακρίβεια και οι δυνατότητες εφαρμογής των αναλυτικών προτύπων αποτελούν τα κύρια πλεονεκτήματά τους σε σχέση με τα απλοποιημένα. Ωστόσο, τα απλοποιημένα πρότυπα και οι αντίστοιχες μέθοδοι εμφανίζουν μία πρακτική αξία η οποία συνίσταται στα εξής :

- Μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε προκαταρκτικούς υπολογισμούς, αποκλείοντας λύσεις εμφανώς μη συμφέρουσες.
- Είναι απλούστερα και μπορούν να εφαρμοστούν ακόμη κι όταν δεν υπάρχουν τα υπολογιστικά μέσα.
- Παρέχουν μια καλή αρχική εκτίμηση της λύσης, εξαιρετικά σημαντική για την αναλυτική μέθοδο.
- Οι αναλυτικές μέθοδοι δεν είναι απαραίτητες όταν τα δεδομένα ισορροπίας ή ενθαλπίας δεν είναι ακριβή.

Η ανάπτυξη ενός προτύπου (αναλυτικού ή απλοποιημένου) απαιτεί τον ακριβή καθορισμό της υπό περιγραφή διεργασίας και του επιπέδου λεπτομέρειάς του. Στην παρούσα εργασία η διεργασία που μελετάται είναι ο διαχωρισμός πολυσυστατικού μίγματος ελαφρών υδρογονανθράκων σε αποστακτική στήλη δίσκων με μία τροφοδοσία και δύο προϊόντα. Η στήλη λειτουργεί σε μόνιμες συνθήκες και οι βαθμίδες της θεωρούνται ιδανικές.

Το επίπεδο λεπτομέρειας του μαθηματικού προτύπου καθορίζεται από τις παραδοχές που γίνονται για την κατάστρωση των εξισώσεων και που στην προκειμένη περίπτωση είναι οι εξής :

- Η γραμμομοριακή ροή των ατμών (ή του υγρού) σε κάθε τμήμα της αποστακτικής (εξάντλησης, εμπλουτισμού) παραμένει σταθερή.
- Οι σχετικές πτητικότητες θεωρείται ότι παραμένουν σταθερές σε κάθε τμήμα της αποστακτικής στήλης.
- Η πίεση λειτουργίας της αποστακτικής στήλης είναι σταθερή.
- Το ρεύμα τροφοδοσίας της αποστακτικής στήλης αναμιγνύεται με τα ρευστά της βαθμίδας τροφοδοσίας πριν από οποιοδήποτε διαχωρισμό.
- Η αναρροή της αποστακτικής στήλης αν ο συμπυκνωτήρας είναι ολικός βρίσκεται σε θερμοκρασία σημείου φυσαλίδας. Οι ατμοί που εξέρχονται από ολικό αναβραστήρα είναι σε θερμοκρασία σημείου δρόσου.

Με βάση τις παραπάνω παραδοχές και τη διατύπωση των ισοζυγίων μάζας στο εσωτερικό της αποστακτικής στήλης, στην παρούσα εργασία αναπτύχθηκε μια πρότυπη

απλοποιημένη αλγεβρική εξίσωση υπολογισμού των ανακτίσεων των συστατικών στο υπόλειμμα. Η σχέση αυτή συνδέει τις συστάσεις των προϊόντων και της τροφοδοσίας με τον αριθμό των θεωρητικών βαθμίδων και τη θέση της βαθμίδας τροφοδοσίας της αποστακτικής στήλης [εξίσωση (5-46)]. Παράλληλα, αναπτύχθηκε προτείνεται ένας τρόπος υπολογισμού της θερμοκρασίας σε κάθε βαθμίδα [με βάση τις εξισώσεις (5-23), (5-41), (5-43)]. Η ανάπτυξη των απλοποιημένων εξισώσεων περιγράφεται αναλυτικά στο κεφάλαιο 5.

Το μαθηματικό πρότυπο, εκτός από τις παραπάνω εξισώσεις, περιλαμβάνει τις απαραίτητες εξισώσεις ισοζυγίων μάζας, ισορροπίας και τις εξισώσεις υπολογισμού των φορτίων του αναβραστήρα και του συμπυκνωτήρα. Για τον υπολογισμό των λόγων ισορροπίας χρησιμοποιείται η συσχέτιση προσέγγισης των διαγραμμάτων DePriester, όπως αυτή αναπτύχθηκε από τον McWilliams. Συνεπώς, το πρότυπο που αναπτύχθηκε αντιμετωπίζει προβλήματα που αφορούν μίγματα που συνίστανται από δύο ή περισσότερα συστατικά του συνόλου των παρακάτω 14 υδρογονανθράκων : Μεθάνιο, αιθυλένιο, αιθάνιο, προπυλένιο, προπάνιο, ισοβουτάνιο, κ-βουτάνιο, ισοπεντάνιο, κ-πεντάνιο, κ-εξάνιο, κ-επτάνιο, κ-οκτάνιο, κ-εννεάνιο, κ-δεκάνιο.

Η διαδικασία επίλυσης του μαθηματικού προτύπου που αναπτύχθηκε υλοποιήθηκε σε γλώσσα προγραμματισμού VISUAL BASIC του EXCEL 5.0. Στο EXCEL 5.0 αναπτύχθηκε επίσης ένα περιβάλλον επικοινωνίας χρήστη-προγράμματος που διευκολύνει την εισαγωγή των δεδομένων και την παρουσίαση των αποτελεσμάτων.

Το πρόγραμμα που αναπτύχθηκε προσφέρεται κυρίως για την προσομοίωση της λειτουργίας αποστακτικής στήλης σε μόνιμη κατάσταση (βαθμονόμηση-αξιολόγηση υπάρχουσας στήλης) και κατά δεύτερο λόγο για το σχεδιασμό μιας νέας αποστακτικής στήλης με δοκιμή και σφάλμα.

Το πρότυπο και το πρόγραμμα που αναπτύχθηκαν ελέγχθηκαν με την επίλυση οκτώ διαφορετικών παραδειγμάτων διαχωρισμού πολυσυστατικών μιγμάτων, τα οποία επιλύθηκαν και με το εμπορικό πακέτο ASPEN PLUS. Οι μέσες αποκλίσεις υπολογίστηκαν σε όρους $1000|\Delta x_i|$, για τα γραμμομοριακά κλάσματα και $\% |\Delta T|$ για την κατανομή θερμοκρασίας στο εσωτερικό της στήλης. Η μέση απόκλιση για τα γραμμομοριακά κλάσματα του υπολείμματος ήταν 7,5. Η μέση απόκλιση για τα γραμμομοριακά κλάσματα του αποστάγματος ήταν 10,3. Η μέση απόκλιση για την θερμοκρασία σε κάθε βαθμίδα ήταν 1,2.

1

Εισαγωγή

Το παρόν κεφάλαιο αποτελεί την εισαγωγή στην εργασία. Σε αυτό αναφέρεται ο σκοπός της εργασίας και γίνεται μία συνοπτική παρουσίαση των υπολοίπων κεφαλαίων και παραρτημάτων της.

1.1 Σκοπός της εργασίας

Σκοπός αυτής της διπλωματικής εργασίας είναι η ανάπτυξη ενός απλοποιημένου μαθηματικού προτύπου περιγραφής της διεργασίας διαχωρισμού πολυσυστατικού μίγματος ελαφρών υδρογονανθράκων σε αποστακτική στήλη με ιδανικές βαθμίδες, με μία τροφοδοσία και δύο προϊόντα.

Οι στόχοι της εργασίας πραγματώνονται με την ανάπτυξη ενός προγράμματος στον Η/Υ που επιλύει το μαθηματικό πρότυπο. Κατά την ανάπτυξη του προγράμματος δίδεται ιδιαίτερη προσοχή στην ευκολία χρήσης και στην ευκρίνεια της παρουσίασης των αποτελεσμάτων.

1.2 Συνοπτική παρουσίαση

Η παρούσα εργασία περιέχει εννέα κεφάλαια καθώς και επτά παραρτήματα. Τα κεφάλαια 2 και 3 αποτελούν το θεωρητικό υπόβαθρο για την ανάπτυξη ενός μαθηματικού προτύπου περιγραφής μιας διεργασίας. Στο κεφάλαιο 2 αναπτύσσονται οι βασικές έννοιες ενός μαθηματικού προτύπου και στο κεφάλαιο 3 περιγράφεται η διεργασία την οποία το μαθηματικό πρότυπο επιχειρεί να προσεγγίσει. Στο τέταρτο κεφάλαιο ταξινομούνται τα συνηθέστερα χρησιμοποιούμενα πρότυπα περιγραφής της διεργασίας απόσταξης. Τα υπόλοιπα κεφάλαια και τα συνοδευτικά παραρτήματα επικεντρώνονται στη διαδικασία ανάπτυξης, διατύπωσης και επίλυσης του απλοποιημένου μαθηματικού προτύπου καθώς και της αξιολόγησης και παρουσίασης των αποτελεσμάτων.

Αναλυτικότερα, στο δεύτερο κεφάλαιο, αφού οριστεί το μαθηματικό πρότυπο περιγραφής μιας διεργασίας, κατατάσσονται οι εξισώσεις του και οι μεταβλητές που συμμετέχουν σε αυτές. Έπειτα, αναλύεται η πρωταρχική για την ανάπτυξη και επίλυση ενός προτύπου έννοια των βαθμών ελευθερίας. Τέλος, αναφέρονται τα κριτήρια με βάση τα οποία ένα πρόβλημα χαρακτηρίζεται ως ευθύ, σχεδιασμού ή ταυτοποίησης.

Στο τρίτο κεφάλαιο περιέχονται στοιχεία και έννοιες αναγκαία για την κατανόηση της διεργασίας της απόσταξης. Τοποθετείται η απόσταξη στην κατάταξη των διαχωρισμών και προσδιορίζονται ο παράγοντας, το μέσο και η διάταξη διαχωρισμού. Στη συνέχεια, περιγράφεται η λειτουργία της διάταξης διαχωρισμού, της αποστακτικής στήλης. Το κεφάλαιο τελειώνει με την ανάπτυξη της έννοιας της ισορροπίας ατμών-υγρού και την αναφορά στην ποσοτική περιγραφή της, τους λόγους ισορροπίας.

Μετά την θεωρητική επισκόπηση της απόσταξης και της αποστακτικής στήλης, στο τέταρτο κεφάλαιο προσδιορίζεται επακριβώς η διεργασία απόσταξης την οποία το πρότυπο επιχειρεί να περιγράψει, καθώς και το είδος του προβλήματος που καλείται το πρότυπο να αντιμετωπίσει. Το επόμενο τμήμα του κεφαλαίου αφιερώνεται στην ταξινόμηση των προτύπων που χρησιμοποιούνται για την περιγραφή της διεργασίας απόσταξης. Επίσης, αναφέρεται πότε είναι εύλογη η χρησιμοποίηση ενός απλοποιημένου προτύπου. Τέλος, παρουσιάζονται οι δύο ευρύτερα χρησιμοποιούμενες απλοποιημένες μέθοδοι, η FUG και η Smith-Brinkley (SB), καθώς και ένα αναλυτικό πρότυπο υπολογισμών.

Στο πέμπτο κεφάλαιο καταρχήν καταγράφονται και σχολιάζονται οι απλοποιητικές παραδοχές περιγραφής της διεργασίας που καθορίστηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο. Κατόπιν, με βάση αυτές τις παραδοχές και τα ισοζύγια μάζας στο εσωτερικό της στήλης αναπτύσσεται μια απλοποιημένη αλγεβρική εξίσωση υπολογισμού των ανακτήσεων των συστατικών στο υπόλειμμα. Η σχέση αυτή συνδέει τις συστάσεις των προϊόντων και της τροφοδοσίας με τον αριθμό των θεωρητικών βαθμίδων και τη θέση της βαθμίδας

τροφοδοσίας της αποστακτικής στήλης. Επίσης, προτείνεται ένας τρόπος υπολογισμού της θερμοκρασίας σε κάθε βαθμίδα. Στο τέλος του κεφαλαίου σχολιάζονται οι προκύπτουσες σχέσεις και η εφαρμογή τους.

Στο επόμενο κεφάλαιο, το έκτο, παρουσιάζεται ολοκληρωμένο το μαθηματικό πρότυπο. Ακολουθεί ο προσδιορισμός των βαθμών ελευθερίας του προτύπου και ο σχολιασμός τους. Στο τέλος, αφού μνημονευτούν τα εναλλακτικά προβλήματα που είναι δυνατό να λυθούν με βάση το πρότυπο, καθορίζεται το σύνολο των προδιαγραφών (διδόμενων μεταβλητών) και περιγράφεται ένας αλγόριθμος επίλυσης του.

Στο έβδομο στη σειρά κεφάλαιο, γίνεται μια απόπειρα για την εκτίμηση της ακρίβειας των αποτελεσμάτων του προγράμματος που αναπτύχθηκε με βάση το απλοποιημένο πρότυπο που παρουσιάζεται στο κεφάλαιο 6. Αφού παρουσιαστεί το μέτρο σύγκρισης των αποτελεσμάτων και αναφερθούν πιθανές αιτίες αστοχίας, παρουσιάζονται με πίνακες και σχήματα τα αποτελέσματα (συστάσεις προϊόντων και κατανομή θερμοκρασίας στο εσωτερικό της στήλης) και οι αποκλίσεις τους για ένα από τα παραδείγματα που εξετάστηκαν. Επίσης, παρουσιάζεται ένας συγκεντρωτικός πίνακας με τις μέσες και μέγιστες αποκλίσεις για καθένα από τα 8 παραδείγματα που μελετήθηκαν. Στο τέλος του κεφαλαίου, μελετάται η ευαισθησία των αποτελεσμάτων σε πιθανές αστοχίες στην εκτίμηση των τιμών των λόγων ισορροπίας.

Στο προτελευταίο κεφάλαιο της εργασίας, το όγδοο, παρουσιάζεται το περιβάλλον επικοινωνίας χρήστη-προγράμματος που δημιουργήθηκε με σκοπό την διευκόλυνση της εισαγωγής των δεδομένων και της γραφικής παρουσίασης των αποτελεσμάτων.

Στο τελευταίο κεφάλαιο, το ένατο, περιέχονται τα συμπεράσματα και οι προτάσεις για μελλοντική εργασία. Αναφέρονται οι πιθανές εφαρμογές του προγράμματος και οι δυνατότητες επέκτασης του προτύπου.

Ο συμπληρωματικός ρόλος των παραρτημάτων στην παρουσίαση της εργασίας κάθε άλλο παρά επουσιώδης μπορεί να χαρακτηριστεί. Στο πρώτο παράρτημα περιέχεται μία επαγωγική απόδειξη της σχέσης υπολογισμού της σύστασης σε κάθε βαθμίδα του τμήματος εξάντλησης. Στο δεύτερο παράρτημα περιγράφεται ο τρόπος απόδειξης της σχέσης υπολογισμού των ανακτήσεων στο υπόλειμμα, που αποτελεί μία από τις βασικές εξισώσεις του προτύπου. Στο επόμενο παράρτημα με αύξοντα αριθμό 3, καταγράφονται οι σχέσεις υπολογισμού των λόγων ισορροπίας των συστατικών και της ειδικής ενθαλπίας μίγματος. Στο τέταρτο στη σειρά παράρτημα περιγράφεται αναλυτικά ο αλγόριθμος επίλυσης του προβλήματος που επιλύει το μαθηματικό πρότυπο. Για κάθε εξίσωση του μαθηματικού προτύπου καθορίζεται η μεταβλητή επίλυσης. Στο πέμπτο παράρτημα, αναφέρονται οι μέθοδοι σύγκλισης των επαναληπτικών διαδικασιών που συναντά κανείς στον αλγόριθμο επίλυσης. Στο έκτο παράρτημα, υπάρχουν τα αποτελέσματα των υπολογισμών για 8 παραδείγματα. Περιέχεται ακόμη η σύγκριση των αποτελεσμάτων του απλοποιημένου με ένα αναλυτικό πρότυπο καθώς και η ανάλυση ευαισθησίας, που αφορά την επίδραση της αστοχίας στην εκτίμηση των λόγων ισορροπίας των συστατικών στα αποτελέσματα. Στο τελευταίο παράρτημα, μπορεί κανείς να δει τον κώδικα του προγράμματος που αναπτύχθηκε για την επίλυση του προτύπου, αλλά και για την ανάπτυξη του περιβάλλοντος επικοινωνίας χρήστη-προγράμματος.

1.3 Σχόλια

Το πακέτο στο οποίο αναπτύχθηκε ο κώδικας επίλυσης του προτύπου και το περιβάλλον επικοινωνίας χρήστη-προγράμματος είναι το EXCEL 5.0. Το πρόγραμμα περιέχεται στη δισκέτα που εσωκλείεται στην εργασία και είναι το αρχείο OPER1.XLS. Για την εξαγωγή των αποτελεσμάτων του αναλυτικού προτύπου τα οποία συγκρίνονται με αυτά του απλοποιημένου (κεφάλαιο 7) χρησιμοποιήθηκε το πακέτο ASPEN-PLUS. Η απόδειξη της

αλγεβρικής εξίσωσης υπολογισμού των ανακτήσεων των συστατικών στο υπόλειμμα (κεφάλαιο 5) πραγματοποιήθηκε στο πρόγραμμα DERIVE 3.0, τον πρόδρομο των πακέτων MATHCAD και MATHEMATICA.

2

Βασικές έννοιες ανάπτυξης μαθηματικών προτύπων

Στο παρόν κεφάλαιο ορίζεται το μαθηματικό πρότυπο περιγραφής μιας διεργασίας. Κατόπιν, ταξινομούνται οι εξισώσεις του και οι μεταβλητές που συμμετέχουν σε αυτές. Στη συνέχεια αναλύονται βασικές έννοιες της ανάπτυξης προτύπων, όπως οι βαθμοί ελευθερίας (BE) και οι μεταβλητές επίλυσης (ME) και τέλος γίνεται μια γενική κατάταξη των προβλημάτων (ευθύ, σχεδιασμού και ταυτοποίησης) που καλείται να επιλύσει ένα μαθηματικό πρότυπο.

2.1 Το μαθηματικό πρότυπο

Η μαθηματική περιγραφή μιας διεργασίας γίνεται με ένα πλήθος εξισώσεων, οι οποίες συνθέτουν ένα σύστημα, το λεγόμενο *μαθηματικό πρότυπο ή μοντέλο της διεργασίας*.

Οι μεταβλητές που συνήθως συμμετέχουν στις εξισώσεις ενός προτύπου περιγραφής μιας διεργασίας της χημικής βιομηχανίας ανήκουν στις παρακάτω κατηγορίες :

- εντασιακές όπως η σύσταση, η θερμοκρασία ή η πίεση.
- εκτασιακές όπως ο ρυθμός ροής ή μεταφερόμενης θερμότητας.
- παράμετροι εξοπλισμού όπως ο αριθμός των θεωρητικών βαθμίδων σε μία αποστακτική στήλη.
- παράμετροι απόδοσης όπως ο βαθμός μετατροπής σε μία χημική αντίδραση.

Στην κατηγορία των εντασιακών μεταβλητών ανήκουν μεταβλητές που είναι ανεξάρτητες από την ποσότητα μάζας του συστήματος στο οποίο αναφέρονται, ενώ σε αυτή των εκτασιακών περιέχονται μεταβλητές που εξαρτώνται από το συνολικό πόσο της μάζας του συστήματος στο οποίο αναφέρονται.

Θα πρέπει να σημειωθεί ότι φυσικές ιδιότητες, όπως η ενθαλπία ή οι λόγοι ισορροπίας δεν συγκαταλέγονται στις μεταβλητές ενός μαθηματικού προτύπου.

Το μαθηματικό μοντέλο περιλαμβάνει διάφορες ομάδες εξισώσεων, οι κυριότερες από τις οποίες είναι :

- Εξισώσεις ισοζυγίων μάζας-ενέργειας : Είναι οι εξισώσεις που εκφράζουν τους νόμους διατήρησης της μάζας και της ενέργειας στη διεργασία. Οι εξισώσεις αυτές σε μόνιμες συνθήκες είναι αλγεβρικές και διαφορικές ως προς το χώρο και τότε το πρότυπο της διεργασίας χαρακτηρίζεται *στατικό*. Σε μη μόνιμες συνθήκες είναι διαφορικές ως προς το χρόνο και το αντίστοιχο πρότυπο λέγεται *δυναμικό*. Το στατικό μαθηματικό πρότυπο χρησιμοποιείται για τον προσδιορισμό των συνθηκών λειτουργίας, των συστάσεων και των παροχών στη μόνιμη κατάσταση, το δε δυναμικό για τον προσδιορισμό του συστήματος αυτομάτου ελέγχου της διεργασίας.
- Εξισώσεις μεταφοράς : Είναι εκείνες που περιγράφουν τα φαινόμενα μεταφοράς μάζας, θερμότητας και ορμής.
- Εξισώσεις κινητικής : Στην κατηγορία αυτή περιλαμβάνονται οι εξισώσεις ρυθμού αντίδρασης.
- Εξισώσεις θερμοδυναμικής ισορροπίας : Οι εξισώσεις αυτές περιγράφουν την κατάσταση ισορροπίας φυσικού συστήματος. Οι περισσότερες συνηθισμένες σ' αυτή την κατηγορία είναι εκείνες των λόγων ισορροπίας.
- Εξισώσεις διαστασιολόγησης - απόδοσης : Αυτές προκύπτουν από προδιαγραφές και πρότυπα, που εκδίδονται είτε από εξουσιοδοτημένες υπηρεσίες κρατών είτε από οργανισμούς με διεθνές κύρος, ή προέρχονται από καθαρά εμπειρικές σχέσεις.
- Εξισώσεις κοστολόγησης : Είναι ειδικές εξισώσεις που χρησιμοποιούνται για την κοστολόγηση του πάγιου εξοπλισμού, συνήθως εμπειρικές.

Οι εξισώσεις του μαθηματικού προτύπου πρέπει να είναι ανεξάρτητες μεταξύ τους. Αν κάποια από τις εξισώσεις προκύπτει με συνδυασμό των υπολοίπων πρέπει να παραληφθεί. Επίσης, οι εξισώσεις που συνθέτουν το μαθηματικό πρότυπο ανάλογα με τις απαιτήσεις μπορεί να είναι απλουστευμένες ή όχι. Το επίπεδο λεπτομέρειας του προτύπου εξαρτάται από το στόχο. Ο καθορισμός του επιπέδου γίνεται με την εμπειρία. Στα πρώτα στάδια μελέτης είναι δυνατό να χρησιμοποιηθούν απλοποιημένες, λόγω παραδοχών, σχέσεις, ενώ στο τελικό στάδιο χρησιμοποιούνται κατά το δυνατό αναλυτικές σχέσεις.

2.2 Βαθμοί ελευθερίας

Μετά τη διαμόρφωση του μαθηματικού προτύπου ακολουθεί η εξέταση των χαρακτηριστικών του συστήματος εξισώσεων που έχει προκύψει. Ας υποθέσουμε ότι το πλήθος των εξισώσεων του μαθηματικού προτύπου είναι E και το πλήθος των μεταβλητών που περιέχονται στις εξισώσεις είναι M . Υπάρχουν οι παρακάτω περιπτώσεις :

- Ο αριθμός των εξισώσεων είναι μεγαλύτερος του αριθμού των μεταβλητών, $E > M$: Για ένα τέτοιο σύστημα δεν υπάρχει λύση αφού είναι υπερορισμένο. Η πιο πιθανή αιτία για αυτό είναι η ύπαρξη ενός αριθμού μη ανεξάρτητων εξισώσεων οι οποίες πρέπει να παραληφθούν.
- Ο αριθμός των εξισώσεων ισούται με τον αριθμό των μεταβλητών, $E = M$: Το σύστημα έχει μοναδική λύση. Σ' αυτή την περίπτωση η διεργασία είναι πλήρως ορισμένη και κατά συνέπεια δεν υπάρχουν εναλλακτικές λύσεις και δυνατότητα αριστοποίησης.
- Ο αριθμός των εξισώσεων είναι μικρότερος του αριθμού των μεταβλητών, $E < M$: Το σύστημα είναι αόριστο και έχει απειρία λύσεων, αφού για κάθε λύση ορίζονται οι τιμές $(M-E)$ μεταβλητών. Έτσι υπάρχει η δυνατότητα εξέτασης εναλλακτικών περιπτώσεων και κατ' επέκταση αριστοποίησης.

Το πλήθος των μεταβλητών που πρέπει να ορισθούν ώστε να έχει το σύστημα εξισώσεων μοναδική λύση είναι οι ελεύθερες μεταβλητές ή οι βαθμοί ελευθερίας (BE). Οι βαθμοί ελευθερίας δίδονται από την εξίσωση :

$$BE = M - E \quad (2-1)$$

Οι υπόλοιπες μεταβλητές, το πλήθος των οποίων είναι E , αποτελούν τις μεταβλητές επίλυσης (ME), δηλαδή είναι οι εξαρτημένες μεταβλητές του συστήματος και λαμβάνονται από τη λύση των εξισώσεων του προτύπου.

Οι BE μιας διεργασίας εκφράζουν τον αριθμό των ανεξάρτητων (ή ελεύθερων) για τη διεργασία μεταβλητών που πρέπει να καθορισθούν για να είναι μονοσήμαντα ορισμένη η διεργασία. Θα πρέπει να τονιστεί ότι οι βαθμοί ελευθερίας είναι χαρακτηριστικό της διεργασίας. Ωστόσο, η σύνθεση του συνόλου των ελεύθερων μεταβλητών εξαρτάται από το πρόβλημα που τίθεται, δηλαδή τις απαντήσεις που ζητούνται καθώς και τις διαθέσιμες μεθόδους ανάλυσης και υπολογισμών.

Κατά τη διαδικασία της καταμέτρησης και καταγραφής των εξισώσεων είναι πιθανό να συμβεί κάποιο λάθος αν παραληφθεί κάποια εξίσωση ή καταγραφούν δύο εξισώσεις οι οποίες δεν είναι ανεξάρτητες. Μια απλούστερη προσέγγιση για τον προσδιορισμό των BE

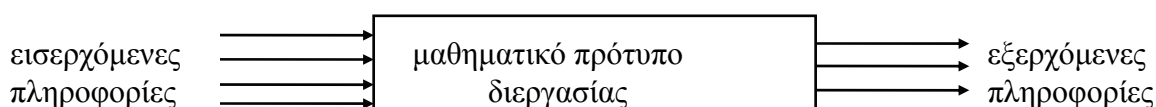
μιας διεργασίας, εκφράζεται από τον περιγραφικό κανόνα του Hanson. Μια από τις ισοδύναμες διατυπώσεις του περιγραφικού κανόνα είναι η παρακάτω :

Ο αριθμός των ελεύθερων μεταβλητών μιας διεργασίας είναι ίσος με τον αριθμό των μεταβλητών, που θα πρέπει να καθοριστούν για τη μονοσήμαντη κατασκευή και ρύθμιση της διεργασίας.

Ο περιγραφικός κανόνας είναι ιδιαίτερα χρήσιμος σε περιπτώσεις όπου οι εξισώσεις περιγραφής μιας διεργασίας είναι πολλές και ο προσδιορισμός των ΒΕ από το μαθηματικό πρότυπο συνιστά διαδικασία επίπονη. Επίσης, μπορεί να βοηθήσει στον εντοπισμό λάθους στην καταγραφή ή καταμέτρηση εξισώσεων και μεταβλητών του μαθηματικού προτύπου.

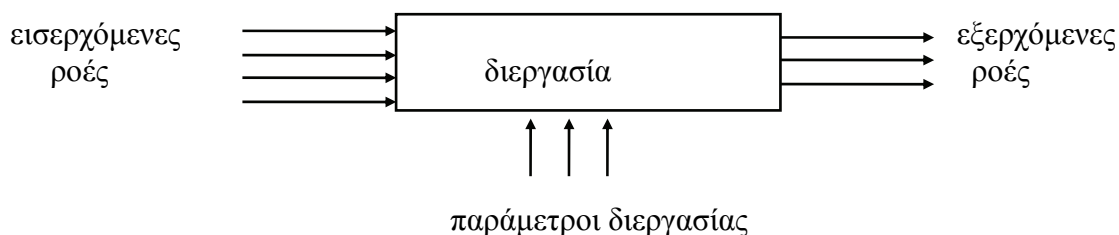
2.3 Είδη προβλημάτων

Οι μεταβλητές ενός μαθηματικού προτύπου μπορεί να είναι μεταβλητές εισόδου που εκφράζουν τις εισερχόμενες πληροφορίες στο πρότυπο ή μεταβλητές εξόδου που εκφράζουν τις εξερχόμενες πληροφορίες από το πρότυπο. Στο σχήμα 2-1 φαίνεται το γενικό διάγραμμα ροής πληροφοριών.



Σχήμα 2-1 : Συνοπτικό διάγραμμα ροής πληροφοριών του μαθηματικού προτύπου.

Το διάγραμμα ροής πληροφοριών αποτελεί μια παράσταση του μαθηματικού χώρου και δεν πρέπει να συγχέεται με τη γενικευμένη απεικόνιση (διάγραμμα ροής) της διεργασίας (σχήμα 2-2), που αποτελεί μία αναπαράσταση του φυσικού χώρου. Οι εισερχόμενες και εξερχόμενες πληροφορίες δεν ταυτίζονται υποχρεωτικά με τις εισερχόμενες και εξερχόμενες ροές αντίστοιχα.



Σχήμα 2-2 : Γενικευμένη απεικόνιση διεργασίας.

Οι παράμετροι της διεργασίας είναι μεταβλητές που χαρακτηρίζουν μια διεργασία όπως γεωμετρικά χαρακτηριστικά, η απόδοση, η απαίτησή της σε ισχύ ή ενέργεια. Δεν περιλαμβάνονται στις μεταβλητές που περιγράφουν τις ροές.

Η κατηγοριοποίηση των προβλημάτων μπορεί να γίνει με βάση ποιες από τις μεταβλητές είναι οι εισερχόμενες πληροφορίες και ποιες είναι οι εξερχόμενες. Έτσι, ένα πρόβλημα μπορεί να χαρακτηριστεί

- ευθύ, όταν οι μεταβλητές των εισερχόμενων ροών και οι παράμετροι της διεργασίας αποτελούν εισερχόμενες πληροφορίες για το γνωστό μαθηματικό πρότυπο και ζητούνται οι μεταβλητές των εξερχόμενων ροών.
- σχεδιασμού, όταν οι μεταβλητές των εισερχομένων και εξερχομένων ροών είναι εισερχόμενες πληροφορίες για το γνωστό μαθηματικό πρότυπο και ζητούνται οι παράμετροι της διεργασίας.
- ταυτοποίησης, όταν είναι γνωστές οι μεταβλητές των εισερχόμενων και εξερχόμενων ροών καθώς και η παράμετροι της διεργασίας και ζητείται να προσδιοριστεί το μαθηματικό πρότυπο.

Οι τρεις παραπάνω ομάδες προβλημάτων αποτελούν τις σημαντικότερες. Ωστόσο, υπάρχουν και περιπτώσεις όπου κάποιο πρόβλημα δεν μπορεί αυστηρά να περιληφθεί σε μία από τις παραπάνω κατηγορίες.

Ο βαθμός δυσκολίας κάθε είδους προβλήματος εξαρτάται από τη διεργασία και τη μέθοδο υπολογισμών που χρησιμοποιείται. Το αναγκαίο για την επίλυση του προβλήματος πλήθος εισερχόμενων πληροφοριών προσδιορίζεται από τους βαθμούς ελευθερίας της διεργασίας.

3

Ορισμός και βασικές έννοιες της απόσταξης

Στο παρόν κεφάλαιο αναπτύσσεται το θεωρητικό υπόβαθρο για την απόσταξη και την αποστακτική στήλη. Σε πρώτη φάση αναφέρονται τα χαρακτηριστικά των διεργασιών διαχωρισμού, περιγράφεται η ταξινόμηση των διαχωρισμών και καθορίζεται η θέση της απόσταξης σε αυτή. Ακολουθεί μία γενική παρουσίαση της λειτουργίας μιας αποστακτικής στήλης και τέλος αναλύεται η θεμελιώδης για την απόσταξη έννοια της *ισορροπίας ατμών-υγρού* και περιγράφονται έννοιες που σχετίζονται με την ισορροπία : *Οι λόγοι ισορροπίας και η σχετική πτητικότητα.*

3.1 Απόσταξη και αποστακτική στήλη

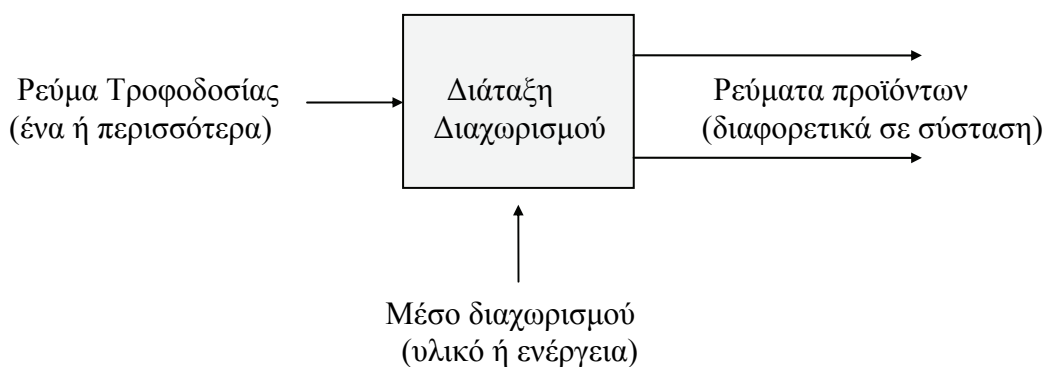
3.1.1 Η θέση της απόσταξης στην ιεραρχία των διαχωρισμών

Η απόσταξη αποτελεί μία διεργασία διαχωρισμού ενός μίγματος συστατικών. Η θέση της στην ιεραρχία των διαχωρισμών θα προσδιοριστεί, αφού οριστεί η διάρθρωση αυτής της ιεραρχίας.

Η ταξινόμηση των διαχωρισμών μπορεί να γίνει βάσει αρκετών κριτηρίων. Πριν την παρουσίαση των κριτηρίων κατάταξης κρίνεται σκόπιμη η παράθεση ορισμένων χαρακτηριστικών των διεργασιών διαχωρισμού.

Χαρακτηριστικά των διεργασιών διαχωρισμού

Ένα απλό διάγραμμα διεργασίας διαχωρισμού φαίνεται στο σχήμα 3-1. Ένα ή περισσότερα υλικά ρεύματα αποτελούν την τροφοδοσία. Υπάρχουν τουλάχιστο δύο υλικά ρεύματα προϊόντων τα οποία διαφέρουν μεταξύ τους ως προς τη σύσταση.



Σχήμα 3-1 : Απλοποιημένο διάγραμμα ροής διεργασίας διαχωρισμού.

Ο διαχωρισμός είναι εφικτός χάρις σε κάποιο χαρακτηριστικό γνώρισμα του συστήματος που λέγεται **παράγοντας διαχωρισμού**. Πρόκειται για την θεμελιώδη φυσική ή χημική αρχή στην οποία βασίζεται ο διαχωρισμός. Θα πρέπει να σημειωθεί ότι ένα σύστημα δεν είναι αναγκαίο να χαρακτηρίζεται από ένα μόνο παράγοντα διαχωρισμού. Με άλλα λόγια, ο διαχωρισμός είναι δυνατό να επιτευχθεί με διάφορες διεργασίες. Ο παράγοντας διαχωρισμού υπάρχει πάντα σε λανθάνουσα μορφή στο σύστημα και για να ενεργοποιηθεί και αξιοποιηθεί χρειάζεται τη **διάταξη διαχωρισμού** και το **μέσο διαχωρισμού**.

Το μέσο διαχωρισμού μπορεί να είναι είτε ενέργεια, είτε ένα υλικό ρεύμα. Γενικά, το μέσο διαχωρισμού συμβάλλει στο σχηματισμό μιας δεύτερης υλικής φάσης. Σε μερικές διεργασίες διαχωρισμού δεν υπάρχει μέσο διαχωρισμού, ενώ σε άλλες χρησιμοποιούνται περισσότερα από ένα.

Ταξινόμηση των διεργασιών διαχωρισμού

Τέσσερα κριτήρια ταξινόμησης των διαχωρισμών αναφέρονται παρακάτω. Το πρώτο κριτήριο κατάταξης αφορά το αν συμβαίνει κατά το διαχωρισμό μεταφορά μάζας σε μοριακή κλίμακα. Με βάση αυτό το κριτήριο διακρίνουμε τους φυσικούς διαχωρισμούς από τους μηχανικούς διαχωρισμούς.

Στους μηχανικούς διαχωρισμούς (mechanical separations) δεν λαμβάνει χώρα μεταφορά μάζας σε μοριακή κλίμακα. Η διάταξη διαχωρισμού απλά χρησιμοποιείται για την

αποσύνδεση των φάσεων μεταξύ τους. Για παράδειγμα, ένα φίλτρο ή μια διάταξη φυγοκεντρικού διαχωρισμού χρησιμοποιείται για το διαχωρισμό στερεάς από υγρή φάση.

Σε όλους τους φυσικούς διαχωρισμούς συμβαίνει μεταφορά μάζας σε μοριακή κλίμακα και για το λόγο αυτό ονομάζονται και διεργασίες μεταφοράς μάζας (mass transfer operations). Η απόσταξη, η εκχύλιση αλλά και η αντίστροφη ώσμωση αποτελούν χαρακτηριστικά παραδείγματα φυσικών διαχωρισμών.

Το δεύτερο κριτήριο ταξινόμησης αφορά τους φυσικούς διαχωρισμούς. Αν η μεταφορά μάζας γίνεται μεταξύ δύο φάσεων (“διαφασική” μεταφορά μάζας), τότε έχουμε τους διαχωρισμούς ισορροπίας, ενώ αν η μεταφορά μάζας γίνεται εντός μίας φάσης (“ενδοφασική” μεταφορά μάζας) τους διαχωρισμούς ρυθμών μεταφοράς μάζας. Στους διαχωρισμούς ισορροπίας (equilibration processes), δύο μη αναμίξιμες φάσεις φθάνουν σε ισορροπία στην οποία έχουν διαφορετικές συστάσεις. Παραδείγματα διαχωρισμών ισορροπίας αποτελούν η εξάτμιση, η κρυστάλλωση, η απόσταξη και η εκχύλιση.

Από την άλλη πλευρά, οι διαχωρισμοί ρυθμών μεταφοράς μάζας (rate-governed processes) οφείλονται σε διαφορές στο ρυθμό μεταφοράς των συστατικών του προς διαχωρισμό μίγματος εντός μιας φάσης. Οι διαφορές στο ρυθμό μεταφοράς οφείλονται στην επιβαλλόμενη δύναμη-αποτέλεσμα μιας βαθμίδας π.χ. συγκέντρωσης, πίεσης, θερμοκρασίας ή ηλεκτρικού δυναμικού. Παραδείγματα διαχωρισμών ρυθμών μεταφοράς μάζας είναι η υπερδιήθηση και η ηλεκτροφόρηση.

Το τρίτο κριτήριο κατάταξης αφορά το μέσο διαχωρισμού. Αν το μέσο διαχωρισμού είναι υλικό, τότε έχουμε τις έμμεσες διεργασίες, ενώ αν το μέσο διαχωρισμού είναι η ενέργεια έχουμε τις άμεσες διεργασίες.

Το τέταρτο κριτήριο είναι οι φάσεις των συστατικών του προς διαχωρισμό μίγματος. Ο αριθμός των φάσεων (3) επιτρέπει 6 διαφορετικές περιπτώσεις διαχωρισμών :

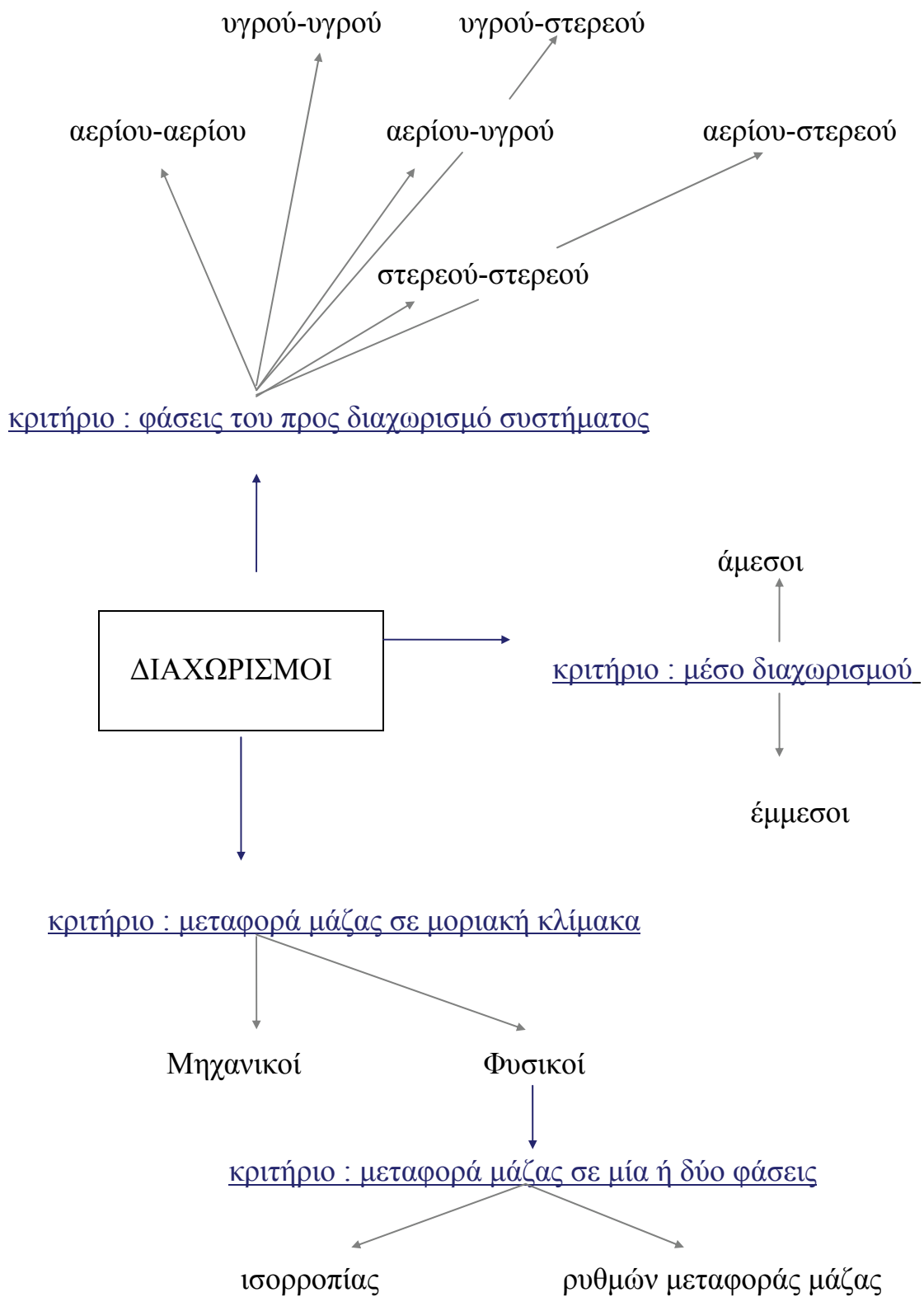
- διαχωρισμοί αερίου-αερίου
- διαχωρισμοί αερίου-υγρού
- διαχωρισμοί αερίου-στερεού
- διαχωρισμοί υγρού-υγρού
- διαχωρισμοί υγρού-στερεού
- διαχωρισμοί στερεού-στερεού

Η ταξινόμηση των διεργασιών διαχωρισμού με βάση τα τέσσερα κριτήρια που αναφέρθηκαν φαίνεται συνοπτικά στο σχήμα 3-2.

Με βάση τα κριτήρια ταξινόμησης που αναφέρθηκαν, η απόσταξη είναι :

- ένας φυσικός διαχωρισμός ισορροπίας,
- μία άμεση διεργασία διαχωρισμού,
- ένας διαχωρισμός υγρού-υγρού.

Ο παράγοντας διαχωρισμού είναι η διαφορά πητικότητας μεταξύ των συστατικών του μίγματος που διαχωρίζεται, το μέσο διαχωρισμού είναι η ενέργεια (θερμότητα) ενώ η διάταξη διαχωρισμού είναι η αποστακτική στήλη.



Σχήμα 3-2 : Ταξινόμηση διαχωρισμών.

3.1.2 Η αποστακτική στήλη

Τον όρο απόσταξη μπορούμε να τον συναντήσουμε σε πολλές διεργασίες διαχωρισμού, όπως :

- διαχωρισμός ισορροπίας με εκτόνωση (Flash Separation).
- διαφορική απόσταξη (Differential ή Batch Distillation).
- απόσταξη με υδρατμούς (Steam Distillation).
- κλασματική απόσταξη (Fractional Distillation).
- εκχυλιστική απόσταξη (Extractive Distillation).
- αζεotropική απόσταξη (Azeotropic Distillation).

Έχει επικρατήσει ο εξής ορισμός για την απόσταξη :

Απόσταξη καλείται η διεργασία διαχωρισμού ενός μίγματος σε στήλη επαφής ατμών-υγρού όπου οι ατμοί ρέουν κατ' αντιστροφή ως προς το υγρό. Στο σύστημα αυτό η συγκέντρωση των πτητικών συστατικών αυξάνει προς την κατεύθυνση ροής των ατμών (προς τα άνω) και έτσι το μίγμα διαχωρίζεται σε δύο προϊόντα, της κορυφής (πτητικό) και του πυθμένα (λιγότερο πτητικό ή μη πτητικό).

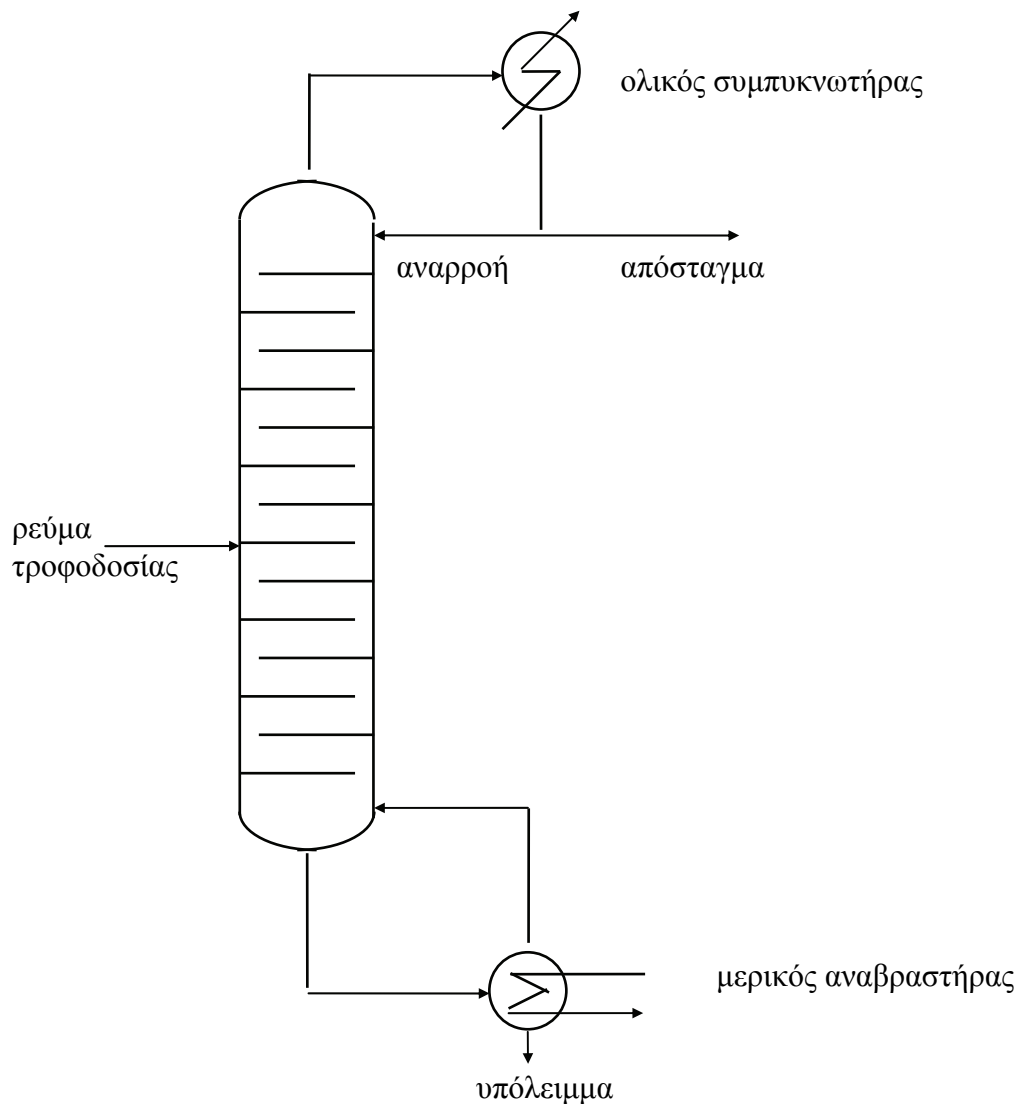
Η επαφή ατμών-υγρού είναι δυνατό να γίνει σε βαθμίδες ή δίσκους οπότε έχουμε τις αποστακτικές στήλες με δίσκους (tray ή plate columns). Σε ορισμένες περιπτώσεις η επαφή ατμών-υγρού γίνεται σε συνεχή ή διαφορική (differential) λειτουργία οπότε έχουμε τους πύργους με πληρωτικά υλικά (packed towers).

Περισσότερο διαδεδομένες είναι οι στήλες με δίσκους. Μία τυπική αποστακτική στήλη με δίσκους φαίνεται στο σχήμα 3-3.

Η τροφοδοσία, που είναι δυνατό να είναι υγρό ή ατμοί ή μίγμα ατμών-υγρού, χωρίζει τη στήλη σε δύο τμήματα. Το τμήμα της στήλης πάνω από την τροφοδοσία ονομάζεται τμήμα εμπλουτισμού (enrichment) ή ανάκτησης (rectifying). Σε αυτό το τμήμα της στήλης επιτυγχάνεται κυρίως η απομάκρυνση των βαρύτερων (λιγότερο πτητικών) συστατικών από το ανερχόμενο ρεύμα ατμών. Έτσι, το ανερχόμενο ρεύμα ατμών εμπλουτίζεται στα ελαφρά (πτητικότερα) συστατικά. Το τμήμα της στήλης κάτω από την τροφοδοσία λέγεται τμήμα εξάντλησης (stripping). Σε αυτό τμήμα επιτυγχάνεται κυρίως η απομάκρυνση των ελαφρών (πτητικότερων) συστατικών από το κατερχόμενο ρεύμα υγρού. Με τον τρόπο αυτό το ρεύμα υγρού εμπλουτίζεται στα βαρύτερα συστατικά.

Οι ατμοί που κυκλοφορούν στη στήλη παράγονται στον αναβραστήρα που υπάρχει στον πυθμένα της. Εκεί επικρατεί και η μέγιστη πίεση, η οποία προκαλείται ακριβώς από την εξάτμιση μέρους του κατερχόμενου υγρού. Οι ατμοί ρέουν προς τα πάνω εξαιτίας της διαφοράς πίεσης που παρατηρείται μεταξύ της κορυφής και του πυθμένα της στήλης.

Το υγρό, που κατέρχεται στη στήλη λόγω βαρύτητας, είναι ένα μέρος των ατμών που εξέρχονται από την κορυφή της. Οι ατμοί που εξέρχονται από την κορυφή συμπυκνώνονται μερικώς ή πλήρως στον μερικό ή ολικό συμπυκνωτήρα, στον οποίο το ψυκτικό μέσο είναι συνήθως το νερό. Μέρος του συμπυκνώματος επιστρέφει στην κορυφή της στήλης ως αναροή, ενώ το υπόλοιπο αποτελεί το ένα από τα προϊόντα της στήλης, το απόσταγμα. Το άλλο προϊόν της αποστακτικής στήλης λαμβάνεται στον πυθμένα της στήλης από τον αναβραστήρα και λέγεται υπόλειμμα.

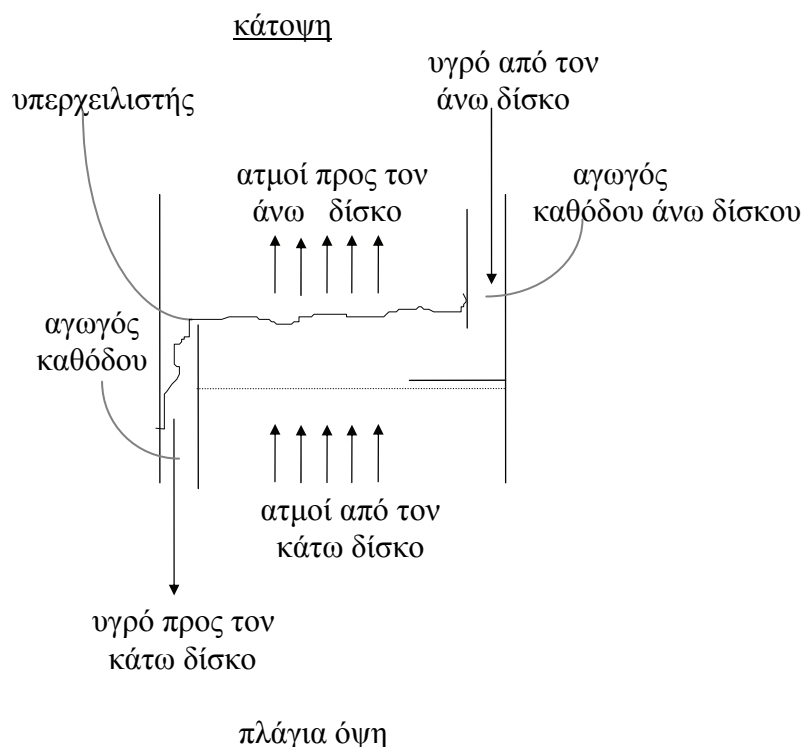
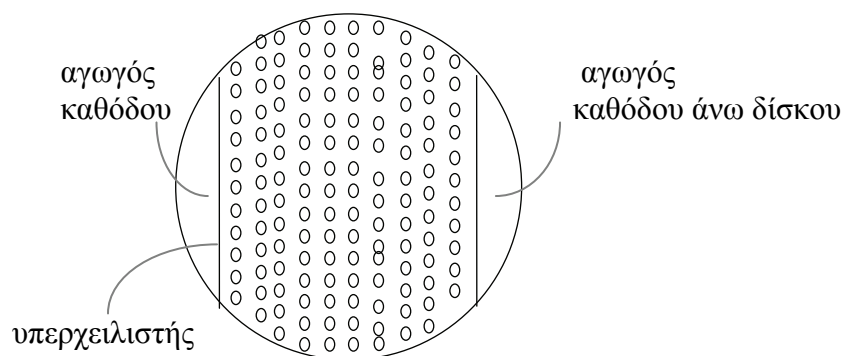


Σχήμα 3-3 : Τυπική αποστακτική στήλη.

Σημαντικό ρόλο στο διαχωρισμό που επιτυγχάνεται σε μια αποστακτική στήλη παίζουν οι δίσκοι της, δηλαδή οι επιφάνειες στις οποίες οι ατμοί έρχονται σε επαφή με το υγρό.

Πολλοί και διαφορετικοί τύποι δίσκων έχουν προταθεί και χρησιμοποιούνται. Ο στόχος είναι η ομοιογένεια των ατμών που εισέρχονται στο δίσκο, η όσο το δυνατό καλύτερη ανάμιξή τους με το υγρό, και στη συνέχεια ο εύκολος και σύντομος διαχωρισμός τους από το υγρό. Ο τύπος δίσκου που φαίνεται στο σχήμα 3-4 είναι ο απλούστερος. Πρόκειται για ένα διάτρητο δίσκο (sieve plate).

Το υγρό κατεβαίνει από τον αγωγό καθόδου (downcomer) του άνω δίσκου και ρέει κατά μήκος του δίσκου, ενώ οι ατμοί από τον κάτω δίσκο διέρχονται από τις οπές και αναμιγνύονται με το υγρό. Σε κάθε δίσκο συμβαίνει μεταφορά μάζας μεταξύ ατμών και υγρού η οποία διευκολύνεται από την προκαλούμενη τυρβώδη ροή. Η μεταφορά μάζας γίνεται και προς τις δύο κατευθύνσεις, δηλαδή από το αέριο στο υγρό και αντιστρόφως. Τα πτητικά συστατικά μεταφέρονται από το υγρό προς τους ατμούς και τα λιγότερο πτητικά από τους ατμούς προς το υγρό.



Σχήμα 3-4 : Διάτρητος δίσκος.

Για την καλύτερη ανάμιξη μεταξύ των φάσεων στο δίσκο και τον αναγκαίο διαχωρισμό ατμών-υγρού στο διάστημα μεταξύ των δίσκων, το υγρό συγκρατείται σε κάθε δίσκο από ένα υπερχειλιστή (weir). Αν το ύψος του υγρού στο δίσκο ξεπεράσει αυτό του υπερχειλιστή, το υγρό μέσω του αγωγού καθόδου του δίσκου μεταφέρεται στον κάτω δίσκο. Ο αγωγός καθόδου παρέχει χώρο και χρόνο για την απομάκρυνση από το υγρό των ατμών που πιθανά παρασύρθηκαν με αυτό.

Στην ανάλυση των αποστακτικών στηλών χρησιμοποιείται η έννοια της **βαθμίδας ισορροπίας** (equilibrium stage) ή **θεωρητικής βαθμίδας**. Σε μία θεωρητική βαθμίδα επέρχεται πλήρης ανάμειξη των φάσεων ατμών-υγρού, έτσι ώστε να επιτευχθεί θερμοδυναμική ισορροπία. Αν ο δίσκος του σχήματος 3-4 είναι βαθμίδα ισορροπίας, τότε θα πρέπει οι ατμοί που εξέρχονται από αυτόν να βρίσκονται σε ισορροπία με το υγρό που τον εγκαταλείπει.

Κατά κανόνα, στους δίσκους μιας αποστακτικής στήλης δεν επιτυγχάνεται ισορροπία μεταξύ ατμών και υγρού. Οι παράγοντες που είναι δυνατό να προκαλέσουν απόκλιση από την ισορροπία είναι :

- περιορισμοί στη μεταφορά μάζας και θερμότητας.

- ελλιπής διαχωρισμός των φάσεων (π.χ. λόγω παράσυρσης).
- η διαμόρφωση της ροής και η μη πλήρης ανάμιξη.

3.2 Βασικές έννοιες απόσταξης

3.2.1 Η έννοια της ισορροπίας ατμών-υγρού

Η έννοια της θερμοδυναμικής ισορροπίας μεταξύ των φάσεων, η οποία έχει θεμελιώδη σημασία για την απόσταξη, διέπεται από τον κανόνα των φάσεων του Gibbs. Ο κανόνας του Gibbs, για ένα σύστημα P φάσεων και C συστατικών, εκφράζεται ως εξής :

$$F + P = C + 2 \quad (3-1)$$

όπου F : ο αριθμός των βαθμών ελευθερίας του συστήματος.
 P : ο αριθμός των φάσεων του συστήματος.
 C : ο αριθμός των συστατικών του συστήματος.

Ο αριθμός των βαθμών ελευθερίας του συστήματος είναι ο αριθμός των ανεξάρτητων μεταβλητών που πρέπει να καθοριστούν για τον πλήρη ορισμό του συστήματος στην ισορροπία. Έτσι, ένα σύστημα 2 φάσεων και 2 συστατικών που βρίσκεται σε ισορροπία, έχει 2 βαθμούς ελευθερίας. Αν σε αυτό το σύστημα πίεση και θερμοκρασία καθοριστούν, οι συστάσεις των φάσεων είναι ορισμένες και μπορούν να προσδιοριστούν πειραματικά ή να υπολογιστούν.

Θα πρέπει να σημειωθεί ότι ο κανόνας αναφέρεται μόνο στις εντασιακές μεταβλητές του συστήματος όπως η πίεση, η θερμοκρασία και τα γραμμομοριακά κλάσματα. Οι εκτασιακές μεταβλητές, όπως ο αριθμός των moles, η παροχή και ο όγκος δεν περιλαμβάνονται στους βαθμούς ελευθερίας του συστήματος.

Ένα σύστημα ατμών-υγρού βρίσκεται σε κατάσταση θερμοδυναμικής ισορροπίας, τότε και μόνο τότε, όταν το σύστημα εμφανίζει ταυτοχρόνως και θερμική και μηχανική και υλική ισορροπία. Το δυναμικό στο οποίο διατυπώνεται κάθε ένα από αυτά τα επί μέρους είδη ισορροπίας μπορεί να είναι, για τη θερμική ισορροπία η θερμοκρασία, για τη μηχανική ισορροπία η πίεση και για την υλική ισορροπία, ειδικά για συστήματα ατμών-υγρού, η τάση διαφυγής (fugacity) ενός συστατικού.

Στα συστήματα ατμών-υγρού στην κατάσταση θερμοδυναμικής ισορροπίας έχουμε :

$$T_{\text{ατμών}} = T_{\text{υγρού}} \quad (3-2)$$

$$P_{\text{ατμών}} = P_{\text{υγρού}} \quad (3-3)$$

$$\hat{f}_i^V = \hat{f}_i^L \quad \text{για κάθε συστατικό } i \text{ του συστήματος} \quad (3-4)$$

όπου \hat{f}_i^V : η τάση διαφυγής του συστατικού i του συστήματος στην αέρια φάση.

\hat{f}_i^L : η τάση διαφυγής του συστατικού i του συστήματος στην υγρή φάση.

3.2.2 Λόγοι ισορροπίας : η ποσοτική περιγραφή της ισορροπίας

Ας υποθεθεί ότι η υγρή και η αέρια φάση ενός μίγματος βρίσκονται σε ισορροπία. Η ισότητα των τάσεων διαφυγής αέριας (V) και υγρής (L) φάσης στην ισορροπία για κάθε συστατικό i του μίγματος

$$\hat{f}_i^V = \hat{f}_i^L \quad (3-5)$$

αποτελεί το σημείο έναρξης όλων των υπολογισμών ισορροπίας ατμών-υγρού.

Η ποσοτική περιγραφή της ισορροπίας ατμών-υγρού εκφράζεται συνήθως με τους λόγους ισορροπίας K_i των συστατικών του μίγματος :

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} \quad (3-6)$$

όπου y_i : το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στη αέρια φάση.
 x_i : το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στην υγρή φάση.

Μία από τις μεθοδολογίες που χρησιμοποιούνται για την περιγραφή της ισορροπίας ατμών-υγρού αναφέρεται παραδοσιακά σαν προσέγγιση γάμμα-φι (γ - ϕ). Σύμφωνα με την προσέγγιση αυτή η τάση διαφυγής ενός συστατικού i του μίγματος ατμών εκφράζεται από την εξίσωση :

$$\hat{f}_i^V = y_i \hat{\Phi}_i^V P \quad (3-7)$$

όπου $\hat{\Phi}_i^V$: ο συντελεστής τάσης διαφυγής του συστατικού i στην αέρια φάση.
 P : η ολική πίεση του συστήματος.
 y_i : το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στην αέρια φάση.

Η τάση διαφυγής του συστατικού i του μίγματος της υγρής φάσης εκφράζεται μέσω της τάσης διαφυγής πρότυπης κατάστασης :

$$\hat{f}_i^L = x_i \gamma_i f_i^o \quad (3-8)$$

όπου f_i^o : η τάση διαφυγής πρότυπης κατάστασης του συστατικού i .
 γ_i : ο συντελεστής ενεργότητας του συστατικού i στην υγρή φάση.
 x_i : το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στην υγρή φάση.

Η τάση διαφυγής πρότυπης κατάστασης του συστατικού i , f_i^o , είναι η τάση διαφυγής του καθαρού συστατικού i , στην πίεση και τη θερμοκρασία του μίγματος. Υπάρχει όμως περίπτωση το καθαρό συστατικό i να μην βρίσκεται στην υγρή φάση στις συνθήκες του μίγματος, δηλαδή η κρίσιμη θερμοκρασία του να είναι μικρότερη από τη θερμοκρασία του μίγματος. Τότε η κατάσταση αναφοράς είναι υποθετική.

Συνδυάζοντας τις σχέσεις (3-5) έως και (3-8), προκύπτει η ακόλουθη έκφραση για του λόγο ισορροπίας του συστατικού i :

$$K_i = \frac{\gamma_i f_i^o}{P \hat{\Phi}_i^V} \quad (3-9)$$

Επειδή

$$\frac{f_i^o}{P} = \Phi_i^L \quad (3-10)$$

όπου Φ_i^L : ο συντελεστής τάσης διαφυγής του καθαρού συστατικού i στην υγρή φάση.

η σχέση (3-9) μπορεί να γραφεί :

$$K_i = \frac{\gamma_i \Phi_i^L}{\hat{\Phi}_i^V} \quad (3-11)$$

Μια ακόμη μεθοδολογία που εφαρμόζεται είναι η προσέγγιση ταυτόχρονης περιγραφής των δύο φάσεων, κατά την οποία η ισορροπία ατμών-υγρού περιγράφεται χρησιμοποιώντας μία μόνο καταστατική εξίσωση και για τις δύο φάσεις. Η τάση διαφυγής για το συστατικό i στην αέρια φάση εκφράζεται με την εξίσωση,

$$\hat{f}_i^V = y_i \hat{\Phi}_i^V P \quad (3-12)$$

όπου $\hat{\Phi}_i^V$: ο συντελεστής τάσης διαφυγής του συστατικού i στην αέρια φάση.
 P : η ολική πίεση του συστήματος.
 y_i : το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στην αέρια φάση.

ενώ στην υγρή από τη σχέση

$$\hat{f}_i^L = x_i \hat{\Phi}_i^L P \quad (3-13)$$

όπου $\hat{\Phi}_i^L$: ο συντελεστής τάσης διαφυγής του συστατικού i στην υγρή φάση.
 P : η ολική πίεση του συστήματος.
 x_i : το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στην αέρια φάση.

Από τις σχέσεις (3-5), (3-6), (3-12) και (3-13) προκύπτει ότι ο λόγος ισορροπίας του συστατικού i δίδεται από τη σχέση :

$$K_i = \frac{\hat{\Phi}_i^L}{\hat{\Phi}_i^V} \quad (3-14)$$

Οι συντελεστές τάσης διαφυγής υγρής και αέριας φάσης υπολογίζονται χρησιμοποιώντας μία καταστατική εξίσωση.

Στην μέχρι τώρα περιγραφή της ισορροπίας ατμών-υγρού έχουμε θεωρήσει ότι τα μίγματα ατμών και υγρού είναι πραγματικά. Αν η φάση των ατμών θεωρηθεί ότι ακολουθεί συμπεριφορά ιδανικού αερίου, τότε

$$\hat{\Phi}_i^V = 1$$

και η εξίσωση (3-9) απλοποιείται και γίνεται :

$$K_i = \frac{\gamma_i f_i^o}{P} \quad (3-15)$$

Αν η φάση των ατμών θεωρηθεί ότι ακολουθεί συμπεριφορά ιδανικού αερίου και η υγρή φάση είναι ιδανικό διάλυμα, τότε ισχύει ο νόμος του Raoult και ο νόμος του Dalton, και η μερική πίεση του συστατικού i δίδεται από τη σχέση :

$$P_i = y_i P = x_i P_i^S \quad (3-16)$$

όπου P_i : η μερική πίεση του συστατικού i .
 P_i^S : η τάση ατμών του καθαρού συστατικού i στη θερμοκρασία του μίγματος.
 P : η ολική πίεση του συστήματος.
 y_i : το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στην αέρια φάση.
 x_i : το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στην υγρή φάση.

Σε αυτή την περίπτωση ο λόγος ισορροπίας του συστατικού i του μίγματος εκφράζεται από τη σχέση :

$$K_i = \frac{P_i^S}{P} \quad (3-17)$$

Εκτός από τις αναλυτικές μεθόδους υπολογισμού των λόγων ισορροπίας υπάρχουν και γραφικές. Στη βιβλιογραφία συναντά κανείς αρκετά διαγράμματα υπολογισμού των λόγων ισορροπίας για ελαφρούς υδρογονάνθρακες συναρτήσει της πίεσης και της θερμοκρασίας όπως τα διαγράμματα DePriester, Kellogg, Edmister-Ruby. Αν και η σύσταση δεν μετέχει στους υπολογισμούς, κάποια μέση επίδραση περιλαμβάνεται στις τιμές των K_i , αφού για την κατασκευή των διαγραμμάτων, εκτός από την καταστατική εξίσωση Benedict-Webb-Rubin (BWR), έχουν χρησιμοποιηθεί και πειραματικά δεδομένα. Εξάλλου, τα διαγράμματα αφορούν συστατικά παρόμοιας μοριακής δομής και μεγέθους, στους λόγους ισορροπίας των οποίων η επίδραση της σύστασης του μίγματος δεν είναι ιδιαίτερα σημαντική.

Σε κάποια άλλα διαγράμματα χρησιμοποιείται η πίεση σύγκλισης (η πίεση στην οποία οι τιμές όλων των K_i είναι ίσες με τη μονάδα) ως τρίτη παράμετρος (εκτός από την πίεση και την θερμοκρασία) για τον υπολογισμό των λόγων ισορροπίας. Παραδείγματα αυτής της κατηγορίας διαγραμμάτων αποτελούν τα διαγράμματα που έχουν εκδώσει η Gas Processors Association (GPA) και το American Petroleum Institute (API).

Η αδυναμία ενσωμάτωσης των διαγραμμάτων υπολογισμού των K_i σε κώδικα προγράμματος οδήγησε στην ανάπτυξη αναλυτικών σχέσεων περιγραφής των διαγραμμάτων. Μια από τις σημαντικότερες αναλυτικές προσεγγίσεις των διαγραμμάτων DePriester είναι αυτή του McWilliams (McWilliams, 1973).

Παρατηρήσεις

1. Στην περίπτωση χαμηλών πιέσεων, η επίδραση της μη ιδανικότητας της αέριας φάσης είναι μικρή. Έτσι, το βασικό πρόβλημα της ποσοτικής περιγραφής είναι η μη ιδανικότητα της υγρής φάσης. Αντίθετα, στην ισορροπία ατμών-υγρού σε υψηλές πιέσεις, η επίδραση της πίεσης είναι σημαντική και στις δύο φάσεις. Κατά συνέπεια η ποσοτική περιγραφή είναι δυσκολότερη. Το μόνο ευνοϊκό σημείο, αν υπάρχει κάποιο στην ισορροπία ατμών-υγρού

σε υψηλές πιέσεις, είναι ότι τα συστήματα που συναντά κανείς στην πράξη (συνήθως υδρογονάνθρακες, που μπορεί να περιέχουν και κάποιο ανόργανο αέριο) τυπικά δεν εμφανίζουν μεγάλη απόκλιση από την ιδανικότητα.

2. Η προσέγγιση της ταυτόχρονης αντιμετώπισης των δύο φάσεων είναι επαρκώς ακριβής μόνο για συστήματα που είναι έως και μετρίως μη ιδανικά, όπως για μίγματα υδρογονανθράκων ή μίγματα υδρογονανθράκων με αέρια όπως το H₂S, CO, CO₂. Για μη ιδανικά συστήματα, αυτή η προσέγγιση δεν παρέχει ικανοποιητική ακρίβεια, εξαιτίας των περιορισμών των διαθέσιμων καταστατικών εξισώσεων όπως η Soave-Redlich-Kwong (SRK), η Redlich-Kwong (RK) και η Peng-Robinson (PR).
3. Η προσέγγιση με βάση την πρότυπη τάση διαφυγής επιτρέπει τη χρήση διαφορετικών καταστατικών εξισώσεων ή εμπειρικών μεθόδων για κάθε φάση και εφαρμόζεται για μίγματα που αποκλίνουν περισσότερο από την ιδανική συμπεριφορά όπως τα πολικά συστήματα.

3.2.3 Η σχετική πτητικότητα

Όπως αναφέρεται στη παράγραφο 3.1.1, ο παράγοντας διαχωρισμού για την απόσταξη είναι η διαφορά στην πτητικότητα των συστατικών του μίγματος που διαχωρίζεται. Η ποσοτικοποίηση αυτής της διαφοράς γίνεται με τον ορισμό της σχετικής πτητικότητας. Η σχετική πτητικότητα του συστατικού *i* ως προς το συστατικό *j*, α_{ij} , ορίζεται από την εξίσωση :

$$\alpha_{ij} = \frac{y_i/x_i}{y_j/x_j} \quad (3-19)$$

- όπου y_i : το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού *i* στην αέρια φάση.
 y_j : το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού *j* στην αέρια φάση.
 x_i : το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού *i* στην υγρή φάση.
 x_j : το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού *j* στην υγρή φάση.

Τα γραμμομοριακά κλάσματα της εξίσωσης (3-19) αναφέρονται στην κατάσταση ισορροπίας του συστήματος.

Από τη σχέση (3-19) παρατηρούμε ότι η σχετική πτητικότητα του συστατικού *i* προς το συστατικό *j* μπορεί να εκφραστεί και σαν συνάρτηση των λόγων ισορροπίας των συστατικών *i* και *j*, δηλαδή :

$$\alpha_{ij} = \frac{K_i}{K_j} \quad (3-20)$$

Πρότυπα επίλυσης για τα προβλήματα διαχωρισμού πολυσυστατικών μιγμάτων σε αποστακτική στήλη

Αρχικά καθορίζεται η διεργασία με την οποία ασχολείται η παρούσα εργασία και το πρόβλημα που καλείται να αντιμετωπίσει. Στη συνέχεια, ταξινομούνται τα χρησιμοποιούμενα για την επίλυση του προβλήματος πρότυπα και παρατίθενται οι εξισώσεις των δύο ευρύτερα εφαρμοσμένων απλοποιημένων μεθόδων, της FUG και της Smith-Brinkley. Τέλος, παρουσιάζεται πρότυπο βαθμίδα ισορροπίας κατάλληλο για αναλυτικούς υπολογισμούς.

4.1 Καθορισμός του προβλήματος

Μετά την παρουσίαση των βασικών εννοιών απόσταξης και την σύντομη περιγραφή της λειτουργίας μιας αποστακτικής στήλης ακολουθεί ο προσδιορισμός των ερωτημάτων που τίθενται στην παρούσα εργασία, ώστε να γίνουν σαφή η διεργασία με την οποία καταπιάνεται και το πρόβλημα που καλείται η εργασία να αντιμετωπίσει.

Η διεργασία με την οποία ασχολείται είναι αυτή του διαχωρισμού πολυσυστατικού μίγματος ελαφρών υδρογονανθράκων σε αποστακτική στήλη δίσκων με μία τροφοδοσία και δύο προϊόντα. Η στήλη λειτουργεί σε μόνιμες συνθήκες και οι βαθμίδες της θεωρούνται ιδανικές.

Το πρόβλημα που καλείται να επιλύσει ανήκει στην κατηγορία των προβλημάτων προσομοίωσης λειτουργίας στη μόνιμη κατάσταση (βαθμονόμησης-αξιολόγησης). Στις επόμενες παραγράφους μνημονεύονται μερικά από τα διαθέσιμα στη βιβλιογραφία πρότυπα.

4.2 Ταξινόμηση των μεθόδων

Οι μέθοδοι επίλυσης στα προβλήματα διαχωρισμού μιγμάτων σε αποστακτική στήλη χωρίζονται σε δύο μεγάλες κατηγορίες : τις απλοποιημένες-προσεγγιστικές και τις αναλυτικές-ακριβείς. Το κριτήριο για αυτή τη διάκριση είναι η απλότητα (ή η πολυπλοκότητα) του αντίστοιχου προτύπου και συνεπώς των υπολογισμών καθώς και η ακρίβεια των αποτελεσμάτων.

Πριν το 1950, οι υπολογισμοί σε προβλήματα αποστακτικής στήλης γίνονταν με το χέρι. Αν και αναλυτικές μέθοδοι ήταν διαθέσιμες, ήταν δύσκολο να χρησιμοποιηθούν. Εφαρμόζονταν μόνο σε στήλες με μικρό αριθμό βαθμίδων. Οι απλοποιημένες μέθοδοι αποτελούσαν το κύριο εργαλείο σχεδιασμού.

Η εμφάνιση των ηλεκτρονικών υπολογιστών (H/Y) αντέστρεψε εντελώς την πρακτική σχεδιασμού. Οι υπολογισμοί με αναλυτικές-ακριβείς μεθόδους, που παλαιότερα διαρκούσαν αρκετές ημέρες ή ακόμη και εβδομάδες μπορούν σήμερα να πραγματοποιηθούν σύντομα και αποτελεσματικά χρησιμοποιώντας έναν H/Y. Στη σύγχρονη πρακτική, οι αναλυτικές μέθοδοι είναι το σημαντικότερο εργαλείο σχεδιασμού.

Επιπλέον, η εξέλιξη των H/Y οδήγησε στην ανάπτυξη αποδοτικότερων αναλυτικών μεθόδων. Οι ακριβείς μέθοδοι που αναπτύχθηκαν τη δεκαετία του 1930 αντικαταστάθηκαν από αποτελεσματικότερες. Η εξέλιξη αυτών των μεθόδων επέτρεψε την εφαρμογή τους σε πολύπλοκα προβλήματα, τα οποία δεν μπορούν να περιγραφούν επαρκώς από απλοποιημένες μεθόδους.

Η ακρίβεια και οι δυνατότητες εφαρμογής των σύγχρονων αναλυτικών μεθόδων αποτελούν τα κύρια πλεονεκτήματα τους σε σχέση με τις απλοποιημένες. Ωστόσο, οι απλοποιημένες εμφανίζουν μια πρακτική αξία η οποία συνίσταται στα εξής :

- Μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε προκαταρκτικούς υπολογισμούς, αποκλείοντας λύσεις εμφανώς μη συμφέρουσες.
- Είναι απλούστερα και μπορούν να εφαρμοστούν ακόμη κι όταν δεν υπάρχουν τα υπολογιστικά μέσα.
- Παρέχουν μια καλή αρχική εκτίμηση της λύσης, εξαιρετικά σημαντική για την αναλυτική μέθοδο.

- Οι αναλυτικές μέθοδοι δεν είναι απαραίτητες όταν τα δεδομένα ισορροπίας ή ενθαλπίας δεν είναι ακριβή.

4.3 Απλοποιημένες μέθοδοι

Οι απλοποιημένες μέθοδοι που χρησιμοποιούνται στους υπολογισμούς σε αποστακτική στήλη κατατάσσονται στις δύο παρακάτω κατηγορίες : Εμπειρικές μέθοδοι και μέθοδοι ομάδων (group-methods).

4.3.1 Εμπειρικές μέθοδοι

Μια εμπειρική μέθοδος προϋποθέτει απλοποιητικές παραδοχές και περιλαμβάνει εμπειρικές συσχετίσεις. Η συνηθέστερα χρησιμοποιούμενη μέθοδος αυτής της κατηγορίας είναι η Fenske-Underwood-Gilliland (FUG).

Η μέθοδος Fenske-Underwood-Gilliland (FUG)

Αποτελεί μέθοδο που εφαρμόζεται κυρίως σε προβλήματα σχεδιασμού, δηλαδή χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό των θεωρητικών βαθμίδων αποστακτικής στήλης διαχωρισμού πολυσύνθετου μίγματος.

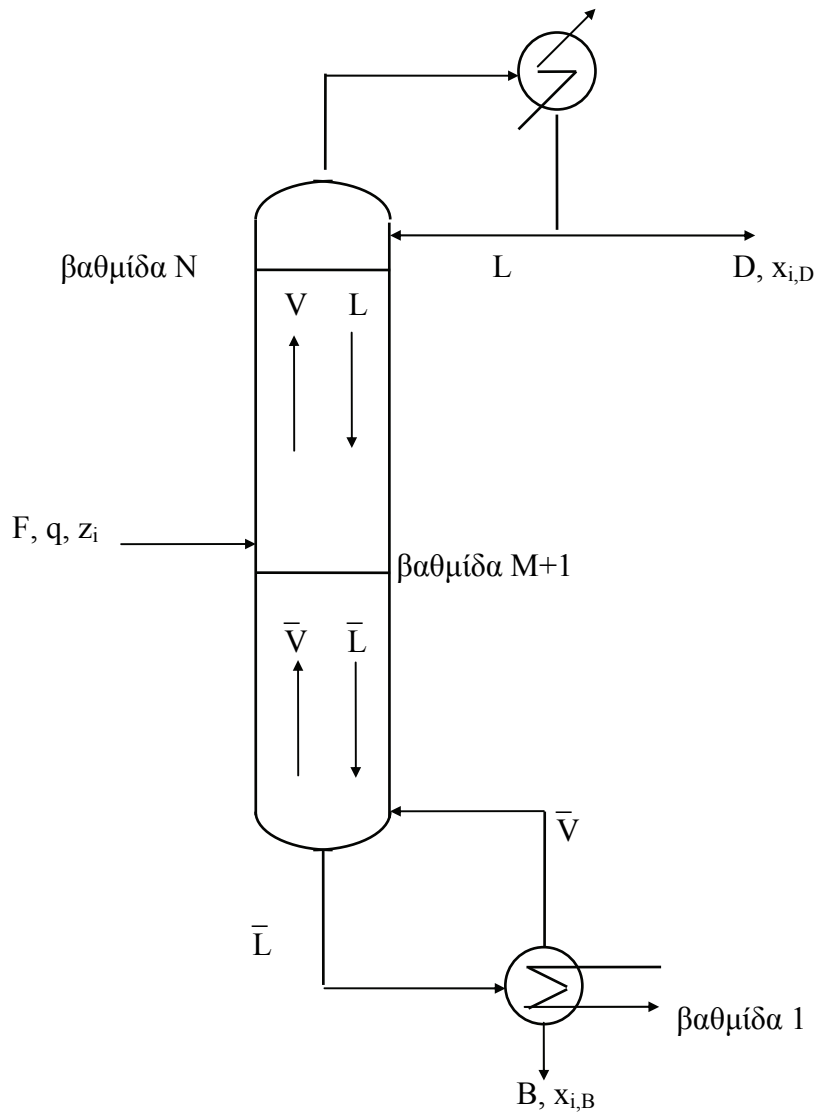
Στην απόσταξη πολυσυστατικών μιγμάτων χρησιμοποιείται ευρέως ο όρος συστατικό κλειδί. Συστατικά κλειδιά είναι δύο συστατικά της τροφοδοσίας των οποίων η ανάκτηση ή το γραμμομοριακό κλάσμα στα προϊόντα καθορίζεται. Το πτητικότερο από αυτά τα συστατικά λέγεται ελαφρύ κλειδί (EK) και το λιγότερο πτητικό βαρύ κλειδί (BK). Τα υπόλοιπα συστατικά του μίγματος ονομάζονται μη κλειδιά (MK). Ειδικότερα, αυτά που είναι περισσότερο πτητικά από τα κλειδιά καλούνται ελαφρά μη κλειδιά (EMK) και αυτά που είναι λιγότερο πτητικά από τα κλειδιά λέγονται βαριά μη κλειδιά (BMK).

Τα συστατικά κλειδιά εμφανίζονται σε σημαντική ποσότητα στο υπόλειμμα και στο απόσταγμα, τα ελαφρά μη κλειδιά καταλήγουν σχεδόν αποκλειστικά στο απόσταγμα και τα βαριά μη κλειδιά σχεδόν αποκλειστικά στο υπόλειμμα.

Σε αρκετούς διαχωρισμούς, υπάρχουν συστατικά των οποίων οι σχετικές πτητικότητες είναι μεταξύ των σχετικών πτητικοτήτων του βαριού και του ελαφρού κλειδιού. Τα συστατικά αυτά λέγονται ενδιάμεσα κλειδιά (intermediate keys) ή κατανεμημένα κλειδιά (distributed keys) και επιμερίζονται στο απόσταγμα και στο υπόλειμμα.

Μετά την παράθεση των, χρήσιμων για την παρουσίαση της FUG, εννοιών αναφέρονται οι προϋποθέσεις για την εφαρμογή της :

- Δεν υπάρχει ενδιάμεσο συστατικό μεταξύ των συστατικών κλειδιών. Αλλιώς απαιτείται τροποποίηση των εξισώσεων Underwood.
- Οι σχετικές πτητικότητες δεν μεταβάλλονται σημαντικά κατά μήκος της στήλης και συνεπώς μπορούν να θεωρηθούν σταθερές.
- Οι γραμμομοριακές ροές υγρού και ατμών σε κάθε τμήμα της στήλης μπορούν να θεωρηθούν σταθερές.



Σχήμα 4-1 : Αποστακτική στήλη με μερικό αναβραστήρα και ολικό συμπυκνωτήρα.

Η μέθοδος περιλαμβάνει τις εξισώσεις :

i) Εξίσωση Fenske

Η εξίσωση δίνει τον αριθμό των θεωρητικών βαθμίδων υπό ολική αναρροή ($R=\infty$), δηλαδή δίνει τον ελάχιστο αριθμό (N_{\min}) των απαιτούμενων για το διαχωρισμό θεωρητικών βαθμίδων.

$$N_{\min} = \frac{\log[(x_{\epsilon\kappa D} / x_{\beta\kappa D}) / (x_{\epsilon\kappa B} / x_{\beta\kappa B})]}{\log(\alpha_{\epsilon\kappa\beta\kappa})} \quad (4-1)$$

ή

$$N_{\min} = \frac{\log \left[\frac{r_{\varepsilon\kappa D} r_{\beta\kappa B}}{(1 - r_{\varepsilon\kappa D})(1 - r_{\beta\kappa B})} \right]}{\log(\alpha_{\varepsilon\kappa\beta\kappa})} \quad (4-2)$$

- όπου $X_{\varepsilon\kappa,D}$: το γραμμομοριακό κλάσμα του ελαφρού κλειδιού στο απόσταγμα.
 $X_{\varepsilon\kappa,B}$: το γραμμομοριακό κλάσμα του ελαφρού κλειδιού στο υπόλειμμα.
 $X_{\beta\kappa,D}$: το γραμμομοριακό κλάσμα του βαριού κλειδιού στο απόσταγμα.
 $X_{\beta\kappa,B}$: το γραμμομοριακό κλάσμα του βαριού κλειδιού στο υπόλειμμα.
 $r_{\varepsilon\kappa,D}$: η ανάκτηση του ελαφρού κλειδιού στο απόσταγμα.
 $r_{\varepsilon\kappa,B}$: η ανάκτηση του ελαφρού κλειδιού στο υπόλειμμα.
 $r_{\beta\kappa,D}$: η ανάκτηση του βαριού κλειδιού στο απόσταγμα.
 $r_{\beta\kappa,B}$: η ανάκτηση του βαριού κλειδιού στο υπόλειμμα.
 $\alpha_{\varepsilon\kappa\beta\kappa}$: μέση σχετική πτητικότητα του ελαφρού προς το βαρύ συστατικό κλειδί. Συνήθως υπολογίζεται ως ο γεωμετρικός μέσος των αντίστοιχων τιμών για το απόσταγμα και το υπόλειμμα.

Αρχικά δεχόμαστε ότι η συγκέντρωση των βαριών συστατικών στο απόσταγμα και των ελαφρών στο υπόλειμμα είναι μηδενική, και υπολογίζουμε μέσω της σχέσης (4-2) μία τιμή για το N_{\min} . Οι ανακτήσεις των μη κλειδιών συστατικών μπορούν να υπολογιστούν γράφοντας την εξίσωση (4-2) για ένα συστατικό μη κλειδί και ένα κλειδί (π.χ. το βαρύ κλειδί) :

$$r_{i,D} = \frac{\alpha_{i\beta\kappa}^{N_{\min}}}{\frac{r_{\beta\kappa,B}}{1 - r_{\beta\kappa,B}} + \alpha_{i\beta\kappa}^{N_{\min}}} \quad (4-3)$$

- όπου $\alpha_{i\beta\kappa}$: μέση σχετική πτητικότητα του μη κλειδιού συστατικού i προς το βαρύ κλειδί. Συνήθως υπολογίζεται ως ο γεωμετρικός μέσος των αντίστοιχων τιμών για το απόσταγμα και το υπόλειμμα.
 $r_{i,D}$: η ανάκτηση του μη κλειδιού συστατικού i στο απόσταγμα.
 $r_{\beta\kappa,B}$: η ανάκτηση του βαριού κλειδιού στο υπόλειμμα.

ii) Εξισώσεις Underwood

Οι εξισώσεις αυτές εφαρμόζονται για την εύρεση του ελάχιστου λόγου αναρροής, R_{\min} , που αντιστοιχεί σε άπειρο αριθμό θεωρητικών βαθμίδων.

$$\sum_{i=1}^C \frac{\alpha_{ij} Z_i}{\alpha_{ij} - \theta} = 1 - q \quad (4-4)$$

$$\sum_{i=1}^C \frac{\alpha_{ij} X_{i,D}}{\alpha_{ij} - \theta} = R_{\min} + 1 \quad (4-5)$$

- όπου Z_i : το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στο ρεύμα τροφοδοσίας.
 $X_{i,D}$: το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στο απόσταγμα.

Οι πτητικότητες a_{ij} είναι οι μέσες πτητικότητες ως προς κάποιο συστατικό j (συνήθως το βαρύ συστατικό κλειδί).

Το q είναι η θερμική κατάσταση της τροφοδοσίας, δηλαδή το κλάσμα της τροφοδοσίας, που είναι κορεσμένο υγρό. Αν η τροφοδοσία είναι κορεσμένο υγρό, τότε $q=1$, ενώ αν είναι κορεσμένοι ατμοί, τότε $q=0$.

Το θ είναι παράμετρος ως προς την οποία λύνεται η εξίσωση (4-4). Μπορεί να προκύψουν περισσότερες από μία λύσεις. Η τιμή του θ που αντικαθίσταται στην εξίσωση (4-5), από την οποία υπολογίζεται το R_{\min} , πρέπει να βρίσκεται μεταξύ των σχετικών πτητικότητων των δύο συστατικών κλειδιών.

iii) Διάγραμμα Gilliland

Το διάγραμμα Gilliland (σχήμα 4-2) δίνει τη σχέση ανάμεσα στις συντεταγμένες X και Y , όπου :

$$X = \frac{R - R_{\min}}{R + 1} \quad (4-6)$$

$$Y = \frac{N - N_{\min}}{N + 1} \quad (4-7)$$

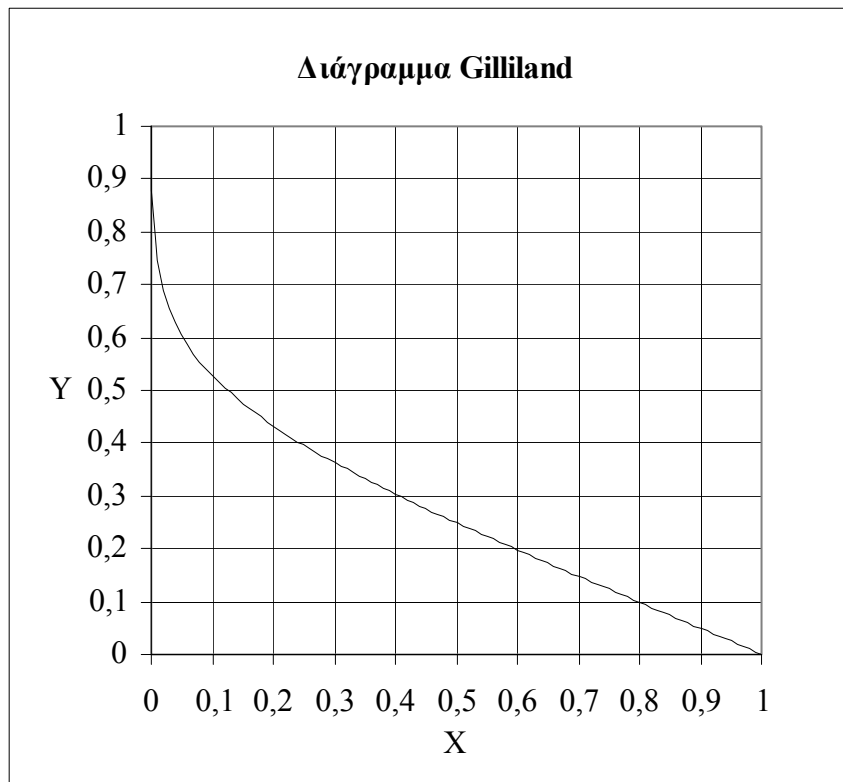
Συνεπώς, αν είναι γνωστός ο λόγος αναρροής R και από τις εξισώσεις Fenske και Underwood υπολογιστούν τα N_{\min} και R_{\min} αντίστοιχα, από το διάγραμμα Gilliland για γνωστό X βρίσκουμε το Y . Επιλύοντας την εξίσωση του Y ως προς N υπολογίζουμε τον αριθμό των θεωρητικών βαθμίδων :

$$N = \frac{N_{\min} + Y}{1 - Y} \quad (4-8)$$

Στον αριθμό των θεωρητικών δίσκων, που υπολογίζεται από το διάγραμμα Gilliland, περιλαμβάνονται, εφόσον υπάρχουν, ο μερικός αναβραστήρας και ο μερικός συμπυκνωτήρας.

Προκειμένου να χρησιμοποιηθεί ηλεκτρονικός υπολογιστής, είναι απαραίτητο να βρεθεί κατάλληλη εξίσωση, που να περιγράφει το διάγραμμα Gilliland. Στη βιβλιογραφία έχουν κατά καιρούς προταθεί πολλές εξισώσεις. Μία από αυτές είναι του Yang-Huan-Chang (Yang-Huan-Chang, 1981) :

$$Y = 1 - \exp(1,49 + 0,315X - 1,805X^{-0,1}) \quad (4-9)$$



Σχήμα 4-2 : Διάγραμμα Gilliland.

Οι τρεις παραπάνω εξισώσεις της μεθόδου FUG συμπληρώνονται από την **εξίσωση Kirkbride** που προσδιορίζει τη βαθμίδα εισαγωγής της τροφοδοσίας :

$$\log\left(\frac{N - (M + 1)}{M}\right) = 0.206 \log\left[\frac{B}{D} \left(\frac{x_{ε κ F}}{x_{β κ F}}\right) \left(\frac{x_{ε κ B}}{x_{β κ D}}\right)^2\right] \quad (4-10)$$

- όπου N : ο αριθμός των θεωρητικών βαθμίδων της αποστακτικής στήλης (περιλαμβάνει μερικό αναβραστήρα και μερικό συμπυκνωτήρα).
M : ο αριθμός των θεωρητικών βαθμίδων κάτω από τη βαθμίδα τροφοδοσίας (περιλαμβάνει και μερικό αναβραστήρα).
B : η γραμμομοριακή παροχή του υπολείμματος (kmoles/h).
D : η γραμμομοριακή παροχή του αποστάγματος (kmoles/h).
 $x_{ε κ, B}$: το γραμμομοριακό κλάσμα του ελαφρού κλειδιού στο υπόλειμμα.
 $x_{β κ, D}$: το γραμμομοριακό κλάσμα του βαριού κλειδιού στο απόσταγμα.

4.3.2 Μέθοδοι ομάδων

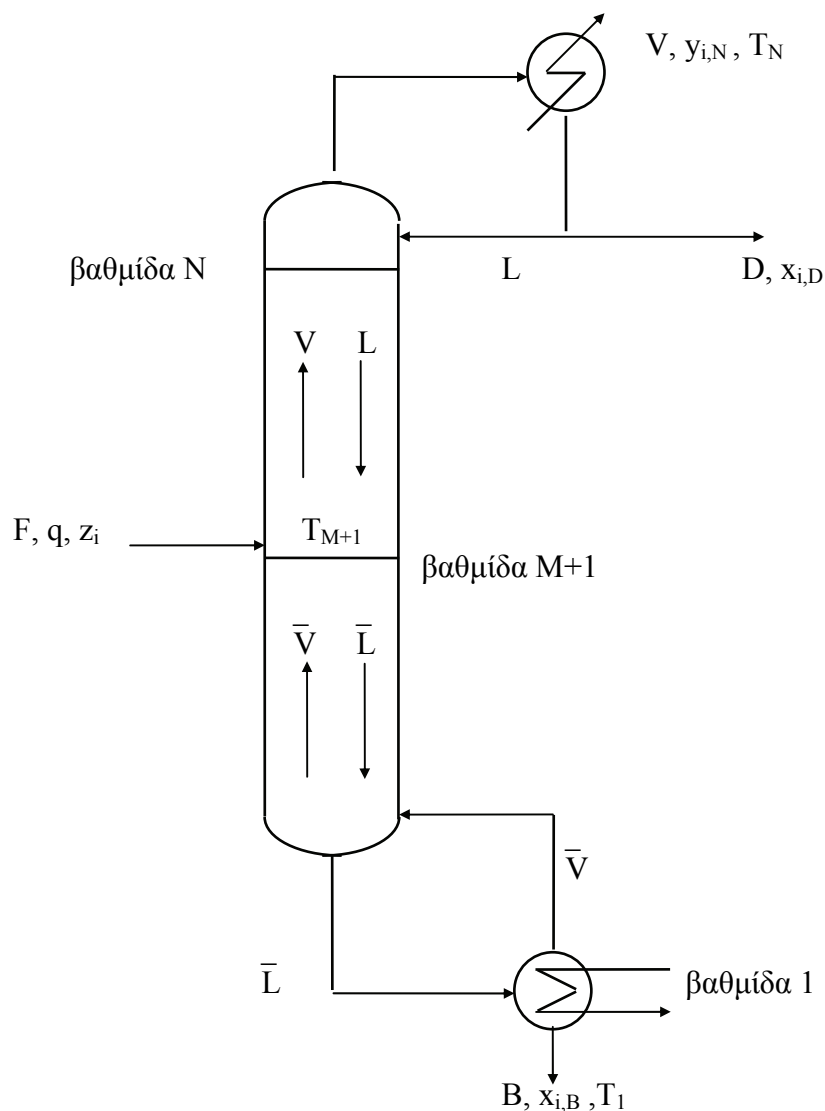
Μία μέθοδος ομάδων (group-method) συσχετίζει τη σύσταση τροφοδοσίας και προϊόντων σε μια διεργασία διαχωρισμού με τον αριθμό των βαθμίδων που απαιτούνται, χωρίς να στέκεται στη σύσταση σε εσωτερικά σημεία της διάταξης όπου διεξάγεται η διεργασία. Αυτή η προσέγγιση απαιτεί την ανάπτυξη αλγεβρικών εξισώσεων που εκφράζουν τις συνδυασμένες επιδράσεις της σύστασης στο εσωτερικό της διάταξης στις συστάσεις των

προϊόντων και προϋποθέτει απλοποιητικές παραδοχές. Χαρακτηριστικό παράδειγμα αυτής της κατηγορίας απλοποιημένων μεθόδων για προβλήματα απόσταξης είναι η μέθοδος Smith-Brinkley (Smith and Brinkley, 1960).

Η μέθοδος Smith-Brinkley (SB)

Η μέθοδος Smith-Brinkley χρησιμοποιείται συνήθως για υπολογισμούς όταν ήδη υπάρχει η αποστακτική στήλη. Επιλύει προσεγγιστικά προβλήματα βαθμονόμησης-αξιολόγησης. Οι παραδοχές που γίνονται για την εφαρμογή της είναι :

- Οι σχετικές πτητικότητες σε κάθε ένα από τα τμήματα της στήλης θεωρούνται σταθερές.
- Οι γραμμομοριακές ροές υγρού και ατμού σε κάθε ένα από τα τμήματα της στήλης μπορούν να θεωρηθούν σταθερές.



Σχήμα 4-3 : Αποστακτική στήλη με μερικό αναβραστήρα και ολικό συμπυκνωτήρα.

Τα μεγέθη $S_{n,i}$, $S_{m,i}$ είναι οι παράγοντες απορρόφησης ή εξάντλησης (stripping factors) του συστατικού i για το άνω και κάτω τμήμα της στήλης. Υπολογίζονται από τις εξισώσεις :

$$S_{n,i} = \frac{K_i V}{L} \quad (4-12)$$

και

$$S_{m,i} = \frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}} \quad (4-13)$$

- όπου
- R : ο εξωτερικός λόγος αναρροής.
 - N : ο αριθμός των θεωρητικών βαθμίδων της αποστακτικής στήλης (περιλαμβάνει μερικό αναβραστήρα).
 - M : ο αριθμός των θεωρητικών βαθμίδων κάτω από τη βαθμίδα τροφοδοσίας (περιλαμβάνει και μερικό αναβραστήρα).
 - L : η γραμμομοριακή παροχή υγρού στο τμήμα εμπλουτισμού (kmoles/h).
 - V : η γραμμομοριακή παροχή ατμών στο τμήμα εμπλουτισμού (kmoles/h).
 - \bar{L} : η γραμμομοριακή παροχή υγρού στο τμήμα εξάντλησης (kmoles/h).
 - \bar{V} : η γραμμομοριακή παροχή ατμών στο τμήμα εξάντλησης (kmoles/h).
 - K_i : ο φαινόμενος λόγος ισορροπίας του συστατικού i στο τμήμα εμπλουτισμού.
 - \bar{K}_i : ο φαινόμενος λόγος ισορροπίας του συστατικού i στο τμήμα εξάντλησης.

Η μεταβλητή h_i εξαρτάται από το ποια τιμή λόγων ισορροπίας (K_i ή \bar{K}_i) χρησιμοποιείται για τη βαθμίδα τροφοδοσίας. Εάν το μεγαλύτερο ποσοστό της τροφοδοσίας βρίσκεται στην υγρή φάση, τότε η βαθμίδα τροφοδοσίας ομαδοποιείται με τις βαθμίδες του τμήματος εξάντλησης και

$$h_i = \frac{\bar{K}_i \left[\frac{L (1 - S_{n,i})}{\bar{L} (1 - S_{m,i})} \right]}{K_i} \quad (4-14)$$

Ενώ εάν το μεγαλύτερο ποσοστό της τροφοδοσίας είναι ατμοί, τότε

$$h_i = \frac{L (1 - S_{n,i})}{\bar{L} (1 - S_{m,i})} \quad (4-15)$$

Οι φαινόμενοι λόγοι ισορροπίας του κάθε τμήματος της στήλης υπολογίζονται σε κάποια μέση θερμοκρασία του αντίστοιχου τμήματος. Στην περίπτωση όπου είναι διαθέσιμη η κατανομή της θερμοκρασίας στη στήλη, η μέση θερμοκρασία του πάνω, T_n , και του κάτω τμήματος, T_m , της στήλης, ισούται με τον αριθμητικό μέσο των θερμοκρασιών όλων των δίσκων του αντίστοιχου τμήματος. Αν δεν είναι διαθέσιμη η κατανομή, χρησιμοποιούνται οι ακόλουθοι αριθμητικοί μέσοι θερμοκρασιών :

$$T_n = \frac{T_N + T_{M+1}}{2} \quad (4-16)$$

$$T_m = \frac{T_1 + T_{M+1}}{2} \quad (4-17)$$

- όπου T_N : η θερμοκρασία κορυφής της αποστακτικής στήλης (K).
 T_1 : η θερμοκρασία πυθμένα της αποστακτικής στήλης (K).
 T_{M+1} : η θερμοκρασία της βαθμίδα τροφοδοσίας (K).

Η SB εφαρμόζεται σε αποστακτική στήλη με μερικό αναβραστήρα ή ακόμη και σε περιπτώσεις προσθήκης θερμότητας στον πυθμένα της στήλης. Η βαθμίδα που βρίσκεται στο χαμηλότερο σημείο της στήλης πρέπει πάντα να αριθμείται με 1. Αν ο αναβραστήρας είναι μερικός αποτελεί τη βαθμίδα νούμερο 1.

Αν ο συμπυκνωτήρας είναι μερικός, τότε τα αποτελέσματα που δίνει για τις ανακτήσεις η SB δεν είναι ακριβή. Οι εξισώσεις της μεθόδου αγνοούν οποιαδήποτε πιθανή διαφορά μεταξύ σύστασης κορυφής και αποστάγματος. Σε αυτή την περίπτωση η προσέγγιση γίνεται ακριβέστερη αν αυξήσουμε το N κατά 1.

4.3.3 Γραφικές μέθοδοι

Χρησιμοποιούνται κυρίως στους υπολογισμούς απόσταξης δυαδικών μιγμάτων. Σε αυτή την κατηγορία μεθόδων οι υπολογισμοί γίνονται επί διαγραμμάτων. Η ευρύτερα εφαρμοζόμενη γραφική μέθοδος είναι η μέθοδος McCabe-Thiele.

4.4 Αναλυτικές μέθοδοι

Εκτός από απλές περιπτώσεις, όπως η απόσταξη δυαδικού μίγματος, οι απλοποιημένες μέθοδοι είναι κατάλληλες μόνο για προκαταρκτικές μελέτες. Ο τελικός σχεδιασμός απαιτεί ακριβή υπολογισμό της θερμοκρασίας, της πίεσης, των ροών και της σύστασης σε κάθε βαθμίδα. Αυτός ο υπολογισμός γίνεται με επίλυση των ισοζυγίων μάζας, ενέργειας και των εξισώσεων ισορροπίας σε κάθε βαθμίδα.

Πιο συγκεκριμένα, οι εξισώσεις που καλείται να επιλύσει αυτός που αντιμετωπίζει το πρόβλημα διαχωρισμού σε αποστακτική στήλη με μια αναλυτική-ακριβή μέθοδο μπορούν να βασιστούν στο πρότυπο βαθμίδα ισορροπίας που φαίνεται στο σχήμα 4-4. Το πρότυπο που απεικονίζεται προϋποθέτει μόνιμες συνθήκες, ισορροπία ατμών-υγρού και απουσία χημικής αντίδρασης. Σημειώνεται ότι με το πρότυπο του σχήματος 4-4 καλύπτει πολύπλοκες διεργασίες με πλάγια προϊόντα και ενδιάμεσους αναβραστήρες και συμπυκνωτήρες, αλλά σίγουρα και τη διεργασία απόσταξης που ορίζεται στην παράγραφο 4.1.

Παρακάτω παρουσιάζονται οι εξισώσεις που περιγράφουν αναλυτικά τη βαθμίδα ισορροπίας του σχήματος 4-4 :

A. Εξισώσεις ισοζυγίου μάζας για κάθε συστατικό (C εξισώσεις για κάθε βαθμίδα) :

$$L_{j+1} x_{i,j+1} + V_{j-1} y_{i,j-1} + F_j z_{i,j} - (L_j + U_j) x_{i,j} - (V_j + W_j) y_{i,j} = 0 \quad (4-18)$$

$$i=1,2,\dots,C \text{ και } j=1,2,\dots,N$$

B. Εξισώσεις ισορροπίας για κάθε συστατικό (C εξισώσεις για κάθε βαθμίδα) :

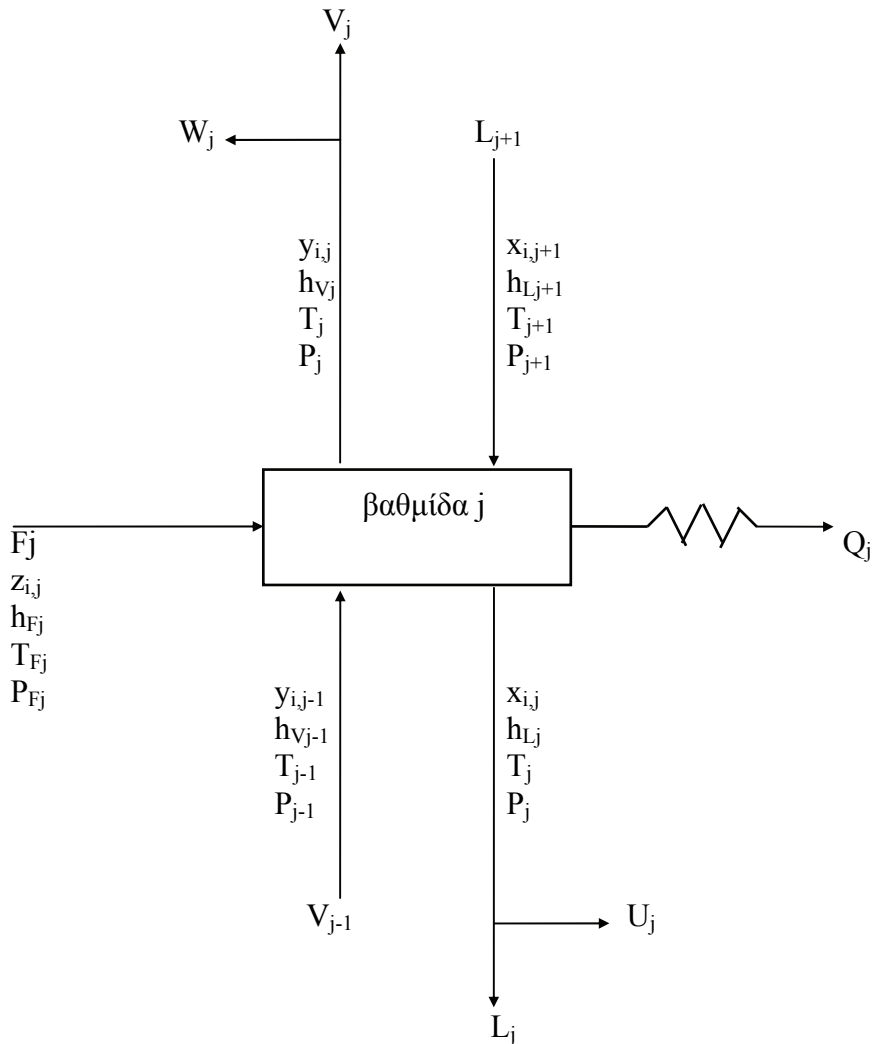
$$y_{i,j} - K_{i,j} x_{i,j} = 0 \quad (4-19)$$

$$i=1,2,\dots,C \text{ και } j=1,2,\dots,N$$

Γ. Εξισώσεις αθροίσματος γραμμομοριακών κλασμάτων (2 εξισώσεις για κάθε βαθμίδα) :

$$\sum_{i=1}^C y_{i,j} - 1 = 0 \quad (4-20)$$

$$\sum_{i=1}^C x_{i,j} - 1 = 0 \quad j=1,2,\dots,N \quad (4-21)$$



Σχήμα 4-4 : Σχηματική απεικόνιση βαθμίδας ισορροπίας.

Δ. Εξισώσεις ισοζυγίου ενέργειας (1 εξίσωση για κάθε βαθμίδα),

$$L_{j+1} h_{Lj+1} + V_{j-1} h_{Vj-1} + F_j h_{Fj} - (L_j + U_j) h_{Lj} - (V_j + W_j) h_{Vj} - Q_j = 0 \quad (4-22)$$

$$j=1,2,\dots,N$$

στις οποίες οι όροι κινητικής και δυναμικής ενέργειας παραλείπονται.

Γενικά

$$K_{i,j} = K_{i,j} (T_j, P_j, x_{i,j}, y_{i,j}),$$

$$h_{Vj} = h_{Vj} (T_j, P_j, y_{i,j}),$$

$$h_{Lj} = h_{Lj} (T_j, P_j, x_{i,j}).$$

$$i=1,2,\dots,C \text{ και } j=1,2,\dots,N$$

- όπου
- V_j : η γραμμομοριακή παροχή των ατμών που αφήνουν τη βαθμίδα j .
 - L_j : η γραμμομοριακή παροχή του υγρού που αφήνει τη βαθμίδα j .
 - U_j : η γραμμομοριακή παροχή υγρού πλάγιου προϊόντος από τη βαθμίδα j .
 - W_j : η γραμμομοριακή παροχή ατμώδους πλάγιου προϊόντος από τη βαθμίδα j .
 - F_j : η γραμμομοριακή παροχή του ρεύματος τροφοδοσίας της βαθμίδας j .
 - P_j : η πίεση στη βαθμίδα j .
 - T_j : η θερμοκρασία στη βαθμίδα j .
 - P_{Fj} : η πίεση του ρεύματος τροφοδοσίας της βαθμίδας j .
 - T_{Fj} : η θερμοκρασία του ρεύματος τροφοδοσίας της βαθμίδας j .
 - $x_{i,j}$: το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στο υγρό ρεύμα που αφήνει τη βαθμίδα j .
 - $y_{i,j}$: το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στο ρεύμα ατμών που αφήνει τη βαθμίδα j .
 - $z_{i,j}$: το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στο ρεύμα τροφοδοσίας της βαθμίδας j .
 - $K_{i,j}$: ο λόγος ισορροπίας του συστατικού i στη βαθμίδα j .
 - h_{Vj} : η ειδική ενθλαπία του μίγματος ατμών που αφήνει τη βαθμίδα j .
 - h_{Lj} : η ειδική ενθλαπία του υγρού μίγματος που αφήνει τη βαθμίδα j .
 - h_{Fj} : η ειδική ενθλαπία του μίγματος τροφοδοσίας της βαθμίδας j .
 - Q_j : η θερμότητα που απομακρύνεται από τη βαθμίδα j .

Για την περιγραφή της θεωρητικής βαθμίδας μπορούν να χρησιμοποιηθούν και άλλες μεταβλητές. Για παράδειγμα, οι ροές του κάθε συστατικού μπορούν να αντικαταστήσουν τα γραμμομοριακά κλάσματα και οι ροές πλάγιων προϊόντων μπορούν να εκφραστούν σαν κλάσματα των ροών εντός της στήλης.

Ανεξάρτητα από το ποιες μεταβλητές χρησιμοποιούνται για την περιγραφή της βαθμίδας ισορροπίας, το σύστημα εξισώσεων που προκύπτει αποτελείται από μη γραμμικές αλγεβρικές εξισώσεις οι οποίες πρέπει να επιλυθούν ταυτόχρονα μέσω επαναληπτικής διαδικασίας. Η διαδικασία αυτή εξαρτάται από τη μέθοδο που χρησιμοποιείται.

Θα πρέπει να γίνει σαφές ότι τα ισοζύγια μάζας και ενέργειας και οι εξισώσεις ισορροπίας δεν αλλάζουν όταν διαφορετικές μέθοδοι υπολογισμού εφαρμόζονται. Ο στόχος των μεθόδων υπολογισμού είναι η αύξηση της ταχύτητας σύγκλισης της διαδικασίας. Ο τρόπος με τον οποίο επιτυγχάνεται αυτός ο στόχος είναι η κατάλληλη αναδιάταξη των εξισώσεων.

Οι πρώτες προσπάθειες για την επίλυση του συστήματος που συνθέτουν οι εξισώσεις που περιγράφονται από τις σχέσεις (4-18) έως και (4-22) (ή ισοδύναμες εκφράσεις τους) οδήγησαν στις κλασικές μεθόδους υπολογισμού βαθμίδα-βαθμίδα των Lewis-Matheson (1932) και Thiele-Geddes (1933). Σήμερα η συνήθης πρακτική είναι η ομαδοποίηση και των εξισώσεων ανά κατηγορία : Όλα τα ισοζύγια μάζας για το συστατικό i ομαδοποιούνται και λύνονται ταυτόχρονα, όλα τα ισοζύγια ενέργειας ομαδοποιούνται και λύνονται ταυτόχρονα κ.ο.κ. Οι περισσότερες από τις εξισώσεις μπορούν εύκολα να γραφούν σε μορφή μητρώων, στα οποία είναι δυνατό να εφαρμοστεί η μέθοδος Newton-Raphson.

Ο Kister (Kister, 1992) αναφέρει ότι δεν υπάρχει μέθοδος η οποία να επιλύει κάθε πρόβλημα. Η επιλογή της καταλληλότερης κατά περίπτωση μεθόδου βασίζεται στον τύπο του

μίγματος (την απόκλιση του από την ιδανικό) και στον τύπο της αποστακτικής στήλης (ύπαρξη ή όχι πλάγιων προϊόντων).

Η ανάπτυξη της απλοποιημένης μεθόδου

Στο κείμενο που ακολουθεί καταρχήν καταγράφονται και σχολιάζονται οι απλοποιητικές παραδοχές περιγραφής της διεργασίας απόσταξης που εξετάζεται στην παρούσα εργασία, όπως αυτή καθορίστηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο. Κατόπιν, με βάση αυτές τις παραδοχές και τα ισοζύγια μάζας στο εσωτερικό της στήλης αναπτύσσονται :

- μια απλοποιημένη αλγεβρική εξίσωση υπολογισμού των ανακτήσεων των συστατικών στο υπόλειμμα. Η σχέση αυτή συνδέει τις συστάσεις των προϊόντων και της τροφοδοσίας με τον αριθμό των θεωρητικών βαθμίδων και τη θέση της βαθμίδας τροφοδοσίας της αποστακτικής στήλης, όπως μία μέθοδος ομάδων (group method).
- ένας τρόπος υπολογισμού της θερμοκρασίας σε κάθε βαθμίδα.

Στο τέλος του κεφαλαίου σχολιάζονται οι προκύπτουσες σχέσεις και η εφαρμογή τους.

5.1 Απλοποιητικές παραδοχές

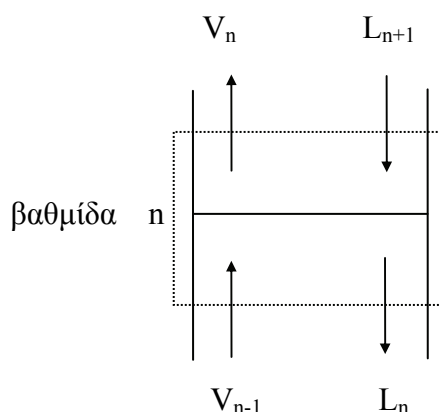
Οι απλοποιητικές παραδοχές που γίνονται προκειμένου να προσεγγίσουμε μια διεργασία διαχωρισμού πολυσυστατικού μίγματος στη μόνιμη κατάσταση σε αποστακτική στήλη θεωρητικών βαθμίδων με μία τροφοδοσία και δύο προϊόντα, σχολιάζονται παρακάτω.

5.1.1 Η παραδοχή σταθερής γραμμομοριακής ροής

Οι γραμμομοριακές ροές (ατμών και υγρού) εντός της στήλης στην πράξη δεν είναι αμετάβλητες. Αρκετοί και ανταγωνιστικοί παράγοντες τις επηρεάζουν. Πριν την αναφορά αυτών των παραγόντων κρίνεται σκόπιμο να διευκρινιστούν τα παρακάτω συναφή με τις ροές και τη μεταβολή τους :

A. Αν η ροή των ατμών (του υγρού) αυξάνεται προς μία κατεύθυνση μέσα στη στήλη, η ροή υγρού (των ατμών) αυξάνεται προς την ίδια κατεύθυνση.

Στο σχήμα 5-1 φαίνεται μια τυπική βαθμίδα στο τμήμα εμπλουτισμού μιας αποστακτικής στήλης.



Σχήμα 5-1 : Τυπική βαθμίδα στο τμήμα εμπλουτισμού αποστακτικής στήλης.

Από το ολικό ισοζύγιο μάζας στη βαθμίδα n ,

$$V_{n-1} + L_{n+1} = V_n + L_n \quad (5-1)$$

όπου L_k : η γραμμομοριακή παροχή υγρού από τη βαθμίδα k στο τμήμα εμπλουτισμού (kmoles/h).

V_k : η γραμμομοριακή παροχή ατμών από τη βαθμίδα k στο τμήμα εμπλουτισμού (kmoles/h).

προκύπτει ότι αν $V_n > V_{n-1}$, τότε,

$$L_{n+1} > L_n.$$

Μάλιστα $L_{n+1} - L_n = V_n - V_{n-1}$. Δηλαδή, το μέγεθος αύξησης είναι το ίδιο και για τις δύο ροές. Αν μάλιστα,

$$V_n = V_{n-1}, \text{ τότε } L_{n+1} = L_n.$$

Συνεπώς αν η ροή ατμών (υγρού) παραμένει σταθερή στο τμήμα εμπλουτισμού της αποστακτικής στήλης, και η ροή υγρού (ατμών) είναι σταθερή στο ίδιο τμήμα. Ακριβώς ίδια ισχύουν και για τις ροές στο τμήμα εξάντλησης.

B. Η γραμμομοριακή ροή ατμών στο τμήμα εμπλουτισμού μιας αποστακτικής στήλης είναι μεγαλύτερη από τη γραμμομοριακή ροή του υγρού. Στο τμήμα εξάντλησης συμβαίνει το αντίθετο.

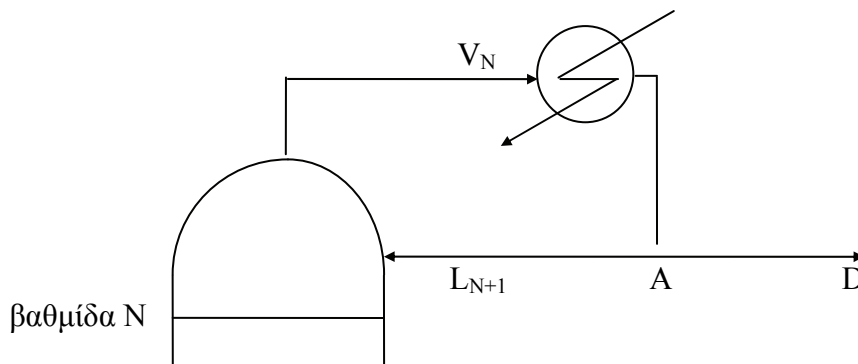
Στο σχήμα 5-2 φαίνεται η κορυφή μιας αποστακτικής στήλης και ο ολικός συμπυκνωτήρας που ακολουθεί. Από το ολικό ισοζύγιο μάζας στον κόμβο A,

$$V_N = L_{N+1} + D \quad (5-2)$$

όπου L_{N+1} : η παροχή της αναρροής στην αποστακτική στήλη, όταν ο συμπυκνωτήρας είναι ολικός (kmoles/h).

D : η γραμμομοριακή παροχή αποστάγματος (kmoles/h).

V_N : η γραμμομοριακή παροχή ατμών από το δίσκο N (kmoles/h).



Σχήμα 5-2 : Κορυφή αποστακτικής στήλης με ολικό συμπυκνωτήρα.

προκύπτει ότι $V_N > L_{N+1}$. Εφόσον το μέγεθος και το πρόσημο της μεταβολής (μείωσης ή αύξησης) της γραμμομοριακής ροής ανά βαθμίδα είναι τα ίδια, μπορούμε να συμπεράνουμε ότι η γραμμομοριακή ροή ατμών στο τμήμα εμπλουτισμού είναι μεγαλύτερη από την γραμμομοριακή ροή του υγρού στο ίδιο τμήμα. Στο ίδιο συμπέρασμα καταλήγουμε ακόμη κι αν ο συμπυκνωτήρας είναι μερικός. Με ανάλογο τρόπο αποδεικνύεται ότι στο τμήμα εξάντλησης η γραμμομοριακή ροή του υγρού είναι μεγαλύτερη από αυτή των ατμών.

Ολοκληρώνοντας την παρένθεση με τις απαραίτητες παρατηρήσεις για τη σχέση της ροής του υγρού με αυτή των ατμών εντός της στήλης, αναφέρουμε τους παράγοντες που επενεργούν στις ροές :

Το μοριακό βάρος του προς διαχωρισμό μίγματος μεταβάλλεται εντός μιας αποστακτικής στήλης. Το μέσο μοριακό βάρος γενικά μειώνεται από τον πυθμένα προς την κορυφή της στήλης, αφού υψηλή πτητικότητα ενός συστατικού γενικά αντιστοιχεί σε χαμηλό μοριακό βάρος. Η γραμμομοριακή λανθάνουσα θερμότητα εξάτμισης είναι συνήθως

μικρότερη για ένα μίγμα μικρότερου μοριακού βάρους. Έτσι, οι ατμοί που εισέρχονται σε μία βαθμίδα, συμπυκνώνονται δημιουργούν μεγαλύτερο ρεύμα εξερχόμενων από τη βαθμίδα ατμών. Συνεπώς, η γραμμομοριακή ροή των ατμών άρα και του υγρού θα πρέπει να αυξάνεται από κάτω προς τα πάνω στα τμήματα (εμπλουτισμού, εξάντλησης) μιας αποστακτικής στήλης.

Αν το προς διαχωρισμό μίγμα είναι δισυστατικό, η διαφορά στις γραμμομοριακές θερμότητες εξάτμισης των καθαρών συστατικών είναι μεγάλη ή τα συστατικά της τροφοδοσίας δεν διαφέρουν σημαντικά στην πτητικότητα, τότε το προηγούμενο σενάριο μεταβολής των ροών επικρατεί (King, 1981), δηλαδή οι γραμμομοριακές ροές αυξάνονται από κάτω προς τα πάνω στα τμήματα της αποστακτικής στήλης.

Σε μια βαθμίδα αποστακτικής στήλης, ατμοί από την προηγούμενη βαθμίδα και υγρό από την επόμενη συναντώνται. Στη βαθμίδα ατμοί και υγρό αναμειγνύονται και λόγω διαφορετικών θερμοκρασιών (των ατμών και του υγρού), ατμοί συμπυκνώνονται και η θερμοκρασία τους μειώνεται, ενώ υγρό εξατμίζεται και η θερμοκρασία του αυξάνεται. Ταυτόχρονα, λαμβάνει χώρα μεταβολή της σύστασης τόσο του υγρού όσο και των ατμών.

Το αν η ροή υγρού που αφήνει τη βαθμίδα είναι μεγαλύτερη από τη ροή του υγρού που εισέρχεται σε αυτή επηρεάζεται από την σχέση θερμοχωρητικότητας των εισερχομένων ρευμάτων υγρού και ατμών. Αν η γραμμομοριακή ροή του υγρού που φτάνει στη βαθμίδα είναι μεγαλύτερη από την αντίστοιχη ροή των ατμών που εισέρχονται σε αυτή, τότε η θερμοχωρητικότητα του υγρού είναι μεγαλύτερη από αυτή των ατμών. Τότε, για τη θέρμανση του υγρού δεν αρκεί η θερμότητα που μεταφέρεται από τους ατμούς και προκαλεί τη μείωση της θερμοκρασίας τους, αλλά απαιτείται και συμπύκνωση μέρους αυτών, με συνέπεια την αύξηση της γραμμομοριακής ροής του υγρού (άρα και των ατμών) από πάνω προς τα κάτω στη στήλη. Αυτή η κατεύθυνση αύξησης των ροών αναμένεται στο τμήμα εξάντλησης, όπου πράγματι η γραμμομοριακή ροή του υγρού είναι μεγαλύτερη από αυτή των ατμών. Με τον ίδιο συλλογισμό καταλήγουμε στο ότι οι ροές αυξάνονται από κάτω προς τα πάνω στο τμήμα εμπλουτισμού, όπου η ροή των ατμών υπερβαίνει αυτή του υγρού.

Τα δύο τελευταία σενάρια μεταβολής των ροών είναι περισσότερο πιθανά, όταν υπάρχουν στην τροφοδοσία μεγάλες ποσότητες συστατικών πολύ ελαφρών ή πολύ βαριών σε σχέση με τα υπόλοιπα, ή γενικότερα όταν το εύρος θερμοκρασιών από τον πυθμένα στην κορυφή της στήλης είναι μεγάλο (King, 1981).

Η αλληλεπίδραση των παραγόντων που επηρεάζουν τις ροές εντός της στήλης είναι πολύπλοκη και ως εκ τούτου δεν επιτρέπει την εξαγωγή κάποιου γενικού κανόνα. Οι παράγοντες αυτοί είναι ανταγωνιστικοί και σε ορισμένες περιπτώσεις οι επιδράσεις τους στις ροές αλληλοεξουδετερώνονται. Αυτό καθιστά την παραδοχή σταθερών γραμμομοριακών ροών εντός της στήλης εξαιρετικά χρήσιμη.

Η παραδοχή είναι χρήσιμη και στην περίπτωση όπου σημαντικές αλλαγές στις ροές δεν προκαλούν ουσιαστική μεταβολή στο λόγο της γραμμομοριακής ροής του υγρού προς τη γραμμομοριακή ροή ατμών. Ο διαχωρισμός εξαρτάται κυρίως από αυτό το λόγο. Έτσι, αν ο λόγος διατηρηθεί σταθερός, ακόμη κι αν οι ροές μεταβάλλονται κατά μήκος της στήλης, η ποιότητα του διαχωρισμού δεν αλλάζει. Όσο πιο κοντά στη μονάδα είναι ο λόγος της γραμμομοριακής ροής του υγρού προς τη γραμμομοριακή ροή ατμών τόσο μικρότερη είναι και η επίδραση της μεταβολής των ροών (στο λόγο και συνεπώς) στο διαχωρισμό.

Η παραδοχή σταθερών γραμμομοριακών ροών εντός της στήλης διατυπώνεται για το τμήμα εξάντλησης μέσω των εξισώσεων :

$$\bar{L}_1 = \bar{L}_2 = \dots = \bar{L}_{j+1} = \dots = \bar{L}_{M+1} = \bar{L} \quad (5-3)$$

$$\text{ή} \quad \bar{V}_1 = \bar{V}_2 = \dots \bar{V}_j = \dots = \bar{V}_M = \bar{V} \quad (5-4)$$

- όπου \bar{L}_k : η γραμμομοριακή παροχή υγρού που αφήνει τη βαθμίδα k στο τμήμα εξάντλησης (kmoles/h).
 \bar{V}_k : η γραμμομοριακή παροχή ατμών που αφήνει τη βαθμίδα k στο τμήμα εξάντλησης (kmoles/h).
M : ο αριθμός των θεωρητικών βαθμίδων κάτω από τη βαθμίδα τροφοδοσίας.

Για το τμήμα εμπλουτισμού, η παραδοχή εκφράζεται αναλυτικά μέσω των εξισώσεων:

$$L_{M+1} = L_{M+2} = \dots = L_{j-1} = \dots = L_N = L \quad (5-5)$$

ή $V_M = V_{M+1} = \dots = V_j = \dots = V_{N+1} = V \quad (5-6)$

- όπου L_k : η γραμμομοριακή παροχή υγρού που αφήνει τη βαθμίδα k στο τμήμα εμπλουτισμού (kmoles/h).
 V_k : η γραμμομοριακή παροχή ατμών που αφήνει τη βαθμίδα k στο τμήμα εμπλουτισμού(kmoles/h).
N : ο αριθμός θεωρητικών βαθμίδων της αποστακτικής στήλης.
M : ο αριθμός των βαθμίδων της αποστακτικής στήλη κάτω από τη βαθμίδα τροφοδοσίας.

Τόσο στο τμήμα εξάντλησης όσο και στο τμήμα εμπλουτισμού, αρκεί να είναι σταθερή η ροή του υγρού (ή των ατμών) ώστε και η ροή των ατμών (του υγρού) να παραμένει σταθερή.

Οι εξισώσεις (5-3) έως (5-6) αντικαθιστούν τα ισοζύγια ενέργειας σε κάθε βαθμίδα και ισχύουν αν κάθε φορά που 1 γραμμομόριο ατμών συμπυκνώνεται, 1 γραμμομόριο υγρού εξατμίζεται. Αυτό συμβαίνει αν παραδεχτούμε ότι :

- Η αποστακτική στήλη λειτουργεί αδιαβατικά.
- Οι θερμοότητες ανάμιξης και οι μεταβολές αισθητής θερμότητας του υγρού και των ατμών είναι αμελητέες.
- Η θερμότητα εξάτμισης ανά γραμμομόριο μίγματος είναι σταθερή (η οποία είναι και η σημαντικότερη παραδοχή).

Ο Perry (Perry's Handbook, 1984) αναφέρει ότι οι καταστάσεις που περιγράφουν οι παραπάνω παραδοχές προσεγγίζονται από μίγματα ισομερών με μικρό εύρος βρασμού. Ο Kister (Kister, 1992) σημειώνει ότι τις παραδοχές πλησιάζουν μίγματα συστατικών με παρόμοια μοριακά βάρη και σχήμα.

5.1.2 Η παραδοχή σταθερών σχετικών πτητικότητων

Οι σχετικές πτητικότητες θεωρείται ότι παραμένουν σταθερές σε κάθε τμήμα (εμπλουτισμού, εξάντλησης) της αποστακτικής στήλης. Η σχετική πτητικότητα είναι ισχυρή εξάρτηση της πίεσης και λιγότερο της θερμοκρασίας.

Η σχετική πτητικότητα μεταξύ των συστατικών i και j ορίζεται ως ο λόγος του λόγου ισορροπίας του συστατικού i προς το λόγο ισορροπίας του συστατικού j (Εξίσωση 3-20). Έτσι, η παραδοχή σταθερών σχετικών πτητικοτήτων, στη γενική περίπτωση, προκύπτει από τη θεώρηση σταθερών λόγων ισορροπίας σε κάθε τμήμα της στήλης.

Ο λόγος ισορροπίας ενός συστατικού είναι μια σύνθετη συνάρτηση της θερμοκρασίας, της πίεσης και των συστάσεων ισορροπίας του υγρού και των ατμών. Ωστόσο για μίγματα συστατικών με παρόμοια δομή και μέγεθος οι των λόγων ισορροπίας εξαρτώνται κυρίως από τη θερμοκρασία και την πίεση. Αυτή η προσέγγιση των λόγων ισορροπίας εφαρμόζεται στην παρούσα εργασία.

5.1.3 Η παραδοχή σταθερής πίεσης στην αποστακτική στήλη

Η πίεση λειτουργίας της αποστακτικής στήλης θεωρείται σταθερή σε όλο το ύψος της. Στην πραγματικότητα, έχουμε μια μικρή μεταβολή της πίεσης ανά δίσκο λόγω της ροής των ατμών διαμέσου των δίσκων. Η πτώση πίεσης ανά δίσκο εξαρτάται από τον τύπο του δίσκου και τις συνθήκες λειτουργίας, ωστόσο κατά προσέγγιση είναι ίση με 0,01 atm (Σαραβάκος, 1985).

Η ισορροπία ατμών-υγρού δεν μεταβάλλεται σημαντικά με μικρές μεταβολές της πίεσης. Η παραδοχή σταθερής πίεσης είναι ικανοποιητική, εκτός από την περίπτωση που η αποστακτική στήλη λειτουργεί υπό κενό ή έχει μεγάλο αριθμό δίσκων (άνω των 50) οπότε η συνολική πτώση πίεσης μεταξύ πυθμένα και κορυφής είναι σημαντική (επιδρά στην ισορροπία ατμών-υγρού) και πρέπει να λαμβάνεται υπόψη.

5.1.4 Η παραδοχή ανάμιξης του ρεύματος τροφοδοσίας με τα ρευστά της βαθμίδας τροφοδοσίας πριν από οποιοδήποτε διαχωρισμό

Υποθέτουμε ότι το ρεύμα τροφοδοσίας αναμιγνύεται με τα ρευστά της βαθμίδας τροφοδοσίας πριν οποιοδήποτε διαχωρισμός συμβεί. Για να είναι απολύτως ακριβής αυτή η παραδοχή, θα πρέπει το ρεύμα τροφοδοσίας να εισάγεται με τέτοιο τρόπο ώστε η πρώτη επαφή ισορροπίας αυτού (του ρεύματος) με το μίγμα της στήλης να επέλθει επί της βαθμίδας (δίσκου) εισαγωγής. Έτσι, η υγρή φάση τροφοδοσίας πρέπει να εισάγεται στον αγωγό καθόδου του δίσκου πάνω από το δίσκο εισαγωγής και οι ατμοί πρέπει να εισάγονται κάτω από τον δίσκο εισαγωγής. Στην πράξη, η εισαγωγή του ρεύματος τροφοδοσίας γίνεται συνήθως μεταξύ του δίσκου εισαγωγής και του αμέσως υπεράνω αυτού δίσκου. Αν το τροφοδοτούμενο μίγμα αποτελείται από δύο φάσεις, το υγρό έρχεται σε πρώτη επαφή με το μίγμα της στήλης επί του δίσκου εισαγωγής, ενώ οι ατμοί επί του αμέσως υπεράνω δίσκου.

Η ίδια παραδοχή ισχύει και για τη γραφική μέθοδο McCabe-Thiele. Ο Kister (Kister, 1992) αναφέρει ότι η αστοχία της μεθόδου McCabe-Thiele, λόγω αυτής της παραδοχής είναι σημαντική μόνο όταν η κατάσταση τροφοδοσίας επηρεάζει σε μεγάλο βαθμό το διαχωρισμό. Αυτό συμβαίνει όταν η στήλη έχει λίγες βαθμίδες (<6) και η σχετική πτητικότητα είναι υψηλή (>3).

5.1.5 Η παραδοχή κορεσμένων ροών

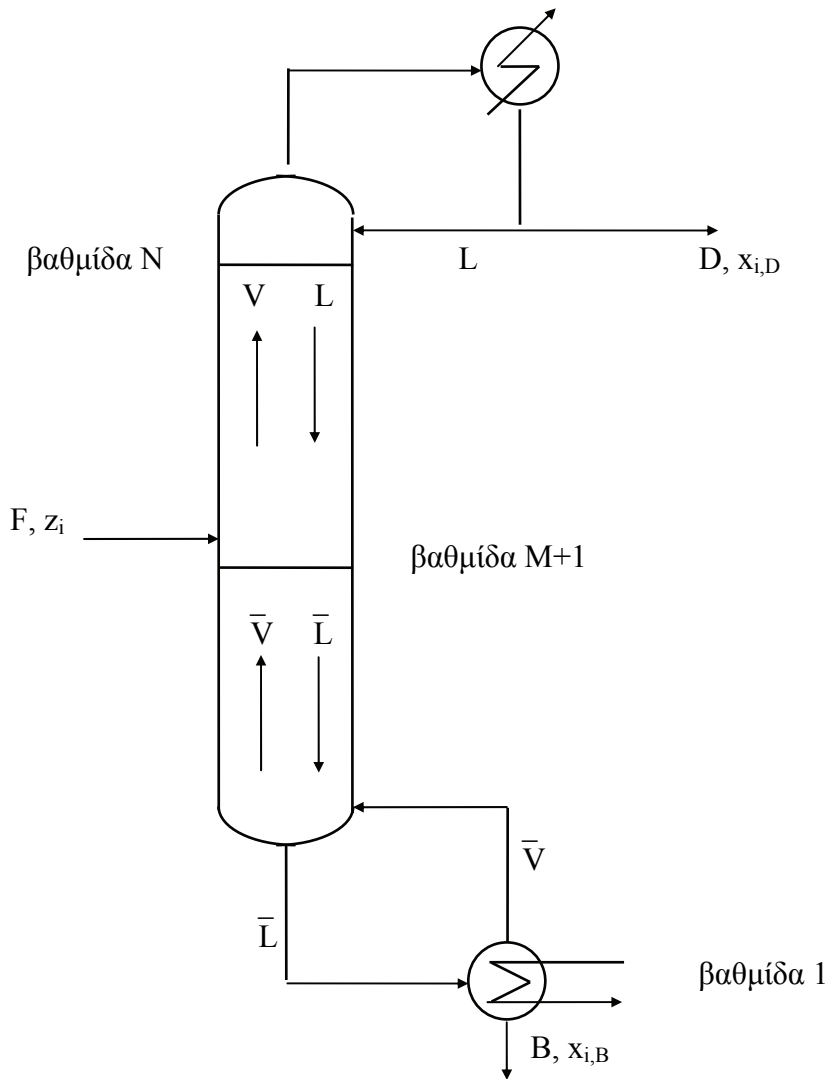
Αν ο συμπυκνωτήρας της αποστακτικής στήλης είναι μερικός, τότε η αναρροή είναι κορεσμένη. Στην ανάπτυξη της απλοποιημένης σχέσης που ακολουθεί, θεωρείται ότι η αναρροή βρίσκεται στο σημείο φυσαλίδας ακόμη κι αν ο συμπυκνωτήρας είναι ολικός. Επίσης οι ατμοί που εξέρχονται από τον αναβραστήρα όταν αυτός είναι ολικός υποθέτουμε ότι βρίσκονται στο σημείο δρόσου.

5.2 Ισοζύγια μάζας

5.2.1 Συμβολισμοί

Στην ανάλυση που ακολουθεί η αρίθμηση των βαθμίδων της αποστακτικής στήλης ξεκινά από τον πυθμένα.

Αν ο αναβραστήρας είναι μερικός αποτελεί τη βαθμίδα 1. Με N συμβολίζουμε το συνολικό αριθμό θεωρητικών βαθμίδων στην αποστακτική στήλη και με M τον αριθμό των θεωρητικών βαθμίδων κάτω από την βαθμίδα τροφοδοσίας. Συνεπώς η βαθμίδα τροφοδοσίας είναι η βαθμίδα $M+1$. Το μίγμα στην τροφοδοσία θεωρείται ότι περιέχει C συστατικά. Επίσης, με V και L συμβολίζουμε τη γραμμομοριακή ροή ατμών και υγρού αντίστοιχα, στο τμήμα εμπλουτισμού, και με \bar{V} και \bar{L} την γραμμομοριακή ροή ατμών και υγρού αντίστοιχα, στο τμήμα εξάντλησης. Η παροχή αποστάγματος συμβολίζεται με D , η παροχή υπολείμματος με B και η παροχή του ρεύματος τροφοδοσίας με F . Το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i απόσταγμα σημειώνεται $x_{i,D}$, στο υπόλειμμα $x_{i,B}$ και στο ρεύμα τροφοδοσίας z_i . Τέλος με $x_{i,k}$ συμβολίζουμε το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στο υγρό ρεύμα που αφήνει τη βαθμίδα k , με $y_{i,k}$ το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στο ρεύμα ατμών που αφήνει τη βαθμίδα k και με \bar{K}_i και K_i τους φαινόμενους λόγους ισορροπίας του συστατικού i στο τμήμα εξάντλησης και στο τμήμα εμπλουτισμού αντίστοιχα.



Σχήμα 5-3 : Αποστακτική στήλη με μερικό αναβραστήρα και ολικό συμπυκνωτήρα.

5.2.2 Ισοζύγια μάζας στο τμήμα εξάντλησης

Το ισοζύγιο μάζας του συστατικού i σε μία τυπική βαθμίδα του τμήματος εξάντλησης εκφράζεται από τη σχέση :

$$y_{i,m-1} \bar{V} + x_{i,m+1} \bar{L} = y_{i,m} \bar{V} + x_{i,m} \bar{L} \quad m= 2,3,\dots,M-1 \quad (5-7)$$

Από τη σχέση (5-7) προκύπτει :

$$x_{i,m+1} = y_{i,m} \left(\frac{\bar{V}}{\bar{L}} \right) + x_{i,m} - y_{i,m-1} \left(\frac{\bar{V}}{\bar{L}} \right) \quad m= 2,3,\dots,M-1 \quad (5-8)$$

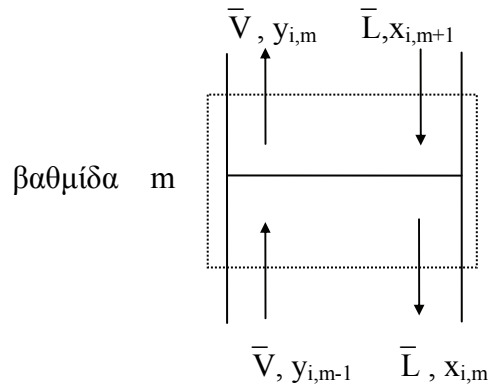
Επειδή

$$y_{i,m} = \bar{K}_i x_{i,m}$$

$$y_{i,m-1} = \bar{K}_i x_{i,m-1}$$

η σχέση (5-8) γίνεται :

$$x_{i,m+1} = \left(1 + \frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}}\right) x_{i,m} - \left(\frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}}\right) x_{i,m-1} \quad m= 2,3,\dots,M-1 \quad (5-9)$$



Σχήμα 5-4 : Τυπική βαθμίδα στο τμήμα εξάντλησης αποστακτικής στήλης.

Από την σχέση (5-9) προκύπτει ότι το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στην υγρή φάση της βαθμίδας m υπολογίζεται με βάση τις αντίστοιχες συστάσεις στις δύο προηγούμενες βαθμίδες από την αναδρομική σχέση :

$$x_{i,m} = \left(1 + \frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}}\right) x_{i,m-1} - \left(\frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}}\right) x_{i,m-2} \quad m = 3,4,\dots,M \quad (5-10)$$

Για τον υπολογισμό των γραμμομοριακών κλασμάτων του συστατικού i στις βαθμίδες $3,4,\dots,M$ του τμήματος εξάντλησης είναι απαραίτητα τα γραμμομοριακά κλάσματα του συστατικού i στις βαθμίδες 1 και 2.

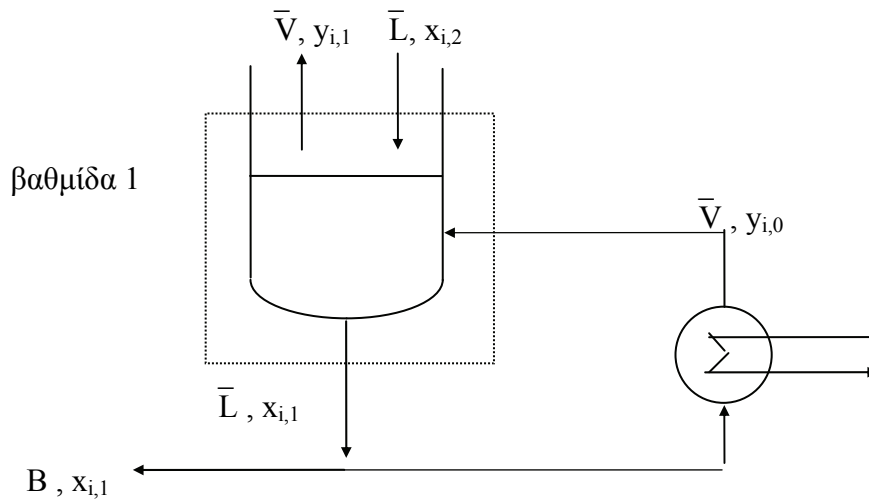
Η σύσταση του υγρού ρεύματος που αφήνει τη βαθμίδα 1 της αποστακτικής στήλης είναι ίδια με αυτή του υπολείμματος, είτε ο αναβραστήρας είναι ολικός, είτε είναι μερικός, δηλαδή :

$$x_{i,1} = x_{i,B} \quad i=1,2,\dots,C \quad (5-11)$$

Έστω ότι ο αναβραστήρας είναι ολικός (σχήμα 5-5). Το ισοζύγιο μάζας για το συστατικό i στην βαθμίδα 1 εκφράζεται από τη σχέση :

$$y_{i,0} \bar{V} + x_{i,2} \bar{L} = y_{i,1} \bar{V} + x_{i,1} \bar{L} \quad (5-12)$$

όπου $y_{i,0}$: το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στο ρεύμα ατμών που αφήνει τον ολικό αναβραστήρα.



Σχήμα 5-5 : Η πρώτη βαθμίδα της αποστακτικής στήλης όταν ο αναβραστήρας είναι ολικός.

Αντικαθιστώντας στην εξίσωση (5-12) τη σχέση ισορροπίας,

$$y_{i,1} = \bar{K}_i x_{i,1}$$

καθώς και την εξίσωση που εκφράζει το ότι η σύσταση των ατμών που αφήνουν τον ολικό αναβραστήρα είναι ίδια με τη σύσταση του υγρού που φτάνει σε αυτόν, δηλαδή

$$y_{i,0} = x_{i,1} \quad i=1,2,\dots,C$$

προκύπτει ότι το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στην υγρή φάση που αφήνει τη βαθμίδα 2 είναι :

$$x_{i,2} = \left\{ 1 + \left(1 - \frac{1}{\bar{K}_i} \right) \left(\frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}} \right) \right\} x_{i,1} \quad (5-13)$$

Έστω ότι ο αναβραστήρας είναι μερικός (σχήμα 5-6). Το ολικό ισοζύγιο μάζας στον αναβραστήρα εκφράζεται από την εξίσωση :

$$\bar{L} = B + \bar{V} \quad (5-14)$$

Το ισοζύγιο μάζας για το συστατικό i στον αναβραστήρα (βαθμίδα 1) εκφράζεται από τη σχέση :

$$x_{i,2} \bar{L} = y_{i,1} \bar{V} + x_{i,1} B \quad (5-15)$$

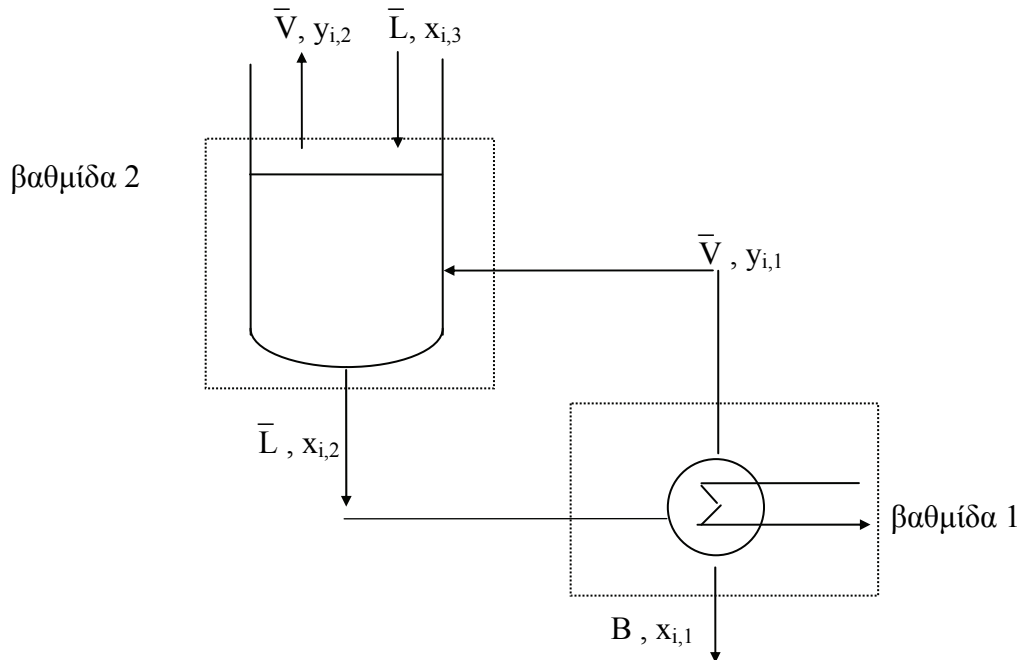
Από τις εξισώσεις (5-14) και (5-15), καθώς και από τη σχέση ισορροπίας

$$y_{i,1} = \bar{K}_i x_{i,1}$$

προκύπτει ότι το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στην υγρή φάση που αφήνει τη βαθμίδα 2 είναι :

$$x_{i,2} = \left\{ 1 + \left(1 - \frac{1}{\bar{K}_i} \right) \left(\frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}} \right) \right\} x_{i,1} \quad (5-16)$$

Καταλήγουμε δηλαδή στην ίδια σχέση είτε ο αναβραστήρας είναι ολικός, είτε είναι μερικός.



Σχήμα 5-6 : Οι βαθμίδες 1 και 2 της αποστακτικής στήλης όταν ο αναβραστήρας είναι μερικός.

Γνωρίζοντας τις εξισώσεις που δίνουν τα $x_{i,1}$, $x_{i,2}$ μπορούμε να εξάγουμε μια γενική σχέση για τον υπολογισμό της σύστασης της υγρής φάσης σε κάθε βαθμίδα στο τμήμα εξάντλησης.

Από την αναδρομική σχέση (5-10)

$$x_{i,m} = \left(1 + \frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}} \right) x_{i,m-1} - \left(\frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}} \right) x_{i,m-2} \quad m = 3, 4, \dots, M$$

για $m = 3$, προκύπτει :

$$x_{i,3} = \left(1 + \frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}} \right) x_{i,2} - \left(\frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}} \right) x_{i,1} \quad (5-17)$$

Αντικαθιστώντας στην εξίσωση (5-17) το $x_{i,2}$ από τη σχέση (5-13) ή (5-16), καταλήγουμε στη σχέση :

$$x_{i,3} = \left\{ 1 + \left(1 - \frac{1}{\bar{K}_i} \right) \left[\frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}} + \left(\frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}} \right)^2 \right] \right\} x_{i,1} \quad (5-18)$$

Από τη σχέση (5-10) για $m=4$, προκύπτει το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στην υγρή φάση της βαθμίδας 4 σαν συνάρτηση των $x_{i,2}$ και $x_{i,3}$. Αν μάλιστα αντικατασταθεί το $x_{i,2}$ από τη σχέση (5-13) ή (5-16), και το $x_{i,3}$ από την εξίσωση (5-18) οδηγούμαστε στη σχέση :

$$x_{i,4} = \left\{ 1 + \left(1 - \frac{1}{\bar{K}_i} \right) \left[\frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}} + \left(\frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}} \right)^2 + \left(\frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}} \right)^3 \right] \right\} x_{i,1} \quad (5-19)$$

Οι σχέσεις υπολογισμού των γραμμομοριακών κλασμάτων του συστατικού i στις υπόλοιπες βαθμίδες είναι της ίδιας μορφής. Έτσι, μπορούμε να γράψουμε μία γενική σχέση για το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στην υγρή φάση στη βαθμίδα m του τμήματος εξάντλησης :

$$x_{i,m} = \left\{ 1 + \left(1 - \frac{1}{\bar{K}_i} \right) \sum_{k=1}^{m-1} \left(\frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}} \right)^k \right\} x_{i,1} \quad m = 2, 3, \dots, M \quad (5-20)$$

Οι όροι του αθροίσματος της σχέσης (5-20) αποτελούν γεωμετρική πρόοδο με πρώτο όρο και λόγο τον

$$\frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}}$$

Το άθροισμα των $m-1$ πρώτων όρων αυτής είναι :

$$\sum_{k=1}^{m-1} \left(\frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}} \right)^k = \frac{\left(\frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}} \right) \left[\left(\frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}} \right)^{m-1} - 1 \right]}{\left(\frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}} \right) - 1} \quad \text{ή}$$

$$\sum_{k=1}^{m-1} \left(\frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}} \right)^k = \frac{\left[\left(\frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}} \right)^m - \left(\frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}} \right) \right]}{\left(\frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}} \right) - 1}$$

Συνεπώς καταλήγουμε στην παρακάτω γενική σχέση για τον υπολογισμό του γραμμομοριακού κλάσματος του συστατικού i του υγρού ρεύματος που αφήνει τη βαθμίδα m :

$$x_{i,m} = \left\{ 1 + \left(1 - \frac{1}{\bar{K}_i} \right) \left[\frac{\left(\frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}} \right)^m - \frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}}}{\frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}} - 1} \right] \right\} x_{i,1} \quad m=2, 3, \dots, M \quad (5-21)$$

Αν ορίσουμε τον παράγοντα εξάντλησης $S_{m,i}$ του συστατικού i στο κάτω τμήμα της αποστακτικής στήλης ως

$$S_{m,i} = \frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}} \quad (5-22)$$

και αφού $x_{i,1} = x_{i,B}$,
η σχέση (5-21) μπορεί να γραφεί :

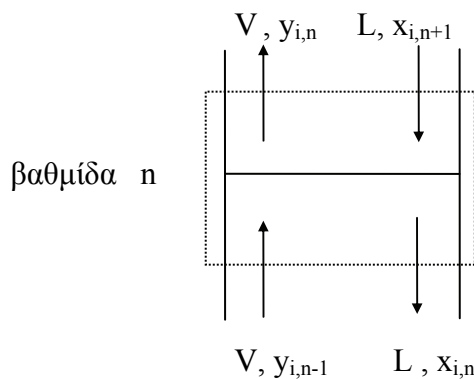
$$x_{i,m} = \left\{ 1 + \left(1 - \frac{1}{\bar{K}_i} \right) \left[\frac{S_{m,i}^m - S_{m,i}}{S_{m,i} - 1} \right] \right\} x_{i,B} \quad m=2,3,\dots,M \quad (5-23)$$

Η απόδειξη ισχύος του γενικού τύπου που περιγράφει η εξίσωση (5-23) γίνεται επαγωγικά και περιέχεται στο παράρτημα 1.

5.2.3 Ισοζύγια μάζας στο τμήμα εμπλουτισμού

Το ισοζύγιο μάζας του συστατικού i σε μία τυπική βαθμίδα του τμήματος εμπλουτισμού εκφράζεται από τη σχέση :

$$y_{i,n-1} V + x_{i,n+1} L = y_{i,n} V + x_{i,n} L \quad n= M+2, M+3, \dots, N-1 \quad (5-24)$$



Σχήμα 5-7 : Τυπική βαθμίδα στο τμήμα εμπλουτισμού αποστακτικής στήλης.

Η σχέση (5-24) σε συνδυασμό με τις εξισώσεις ισορροπίας

$$y_{i,n} = K_i x_{i,n}$$

$$y_{i,n-1} = K_i x_{i,n-1}$$

οδηγεί στην εξίσωση :

$$x_{i,n-1} = \left(1 + \frac{L}{K_i V} \right) x_{i,n} - \frac{L}{K_i V} x_{i,n+1} \quad n= M+3, M+4, \dots, N-1 \quad (5-25)$$

Από την σχέση (5-25) προκύπτει ότι το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στην υγρή φάση της βαθμίδας n υπολογίζεται με βάση τις αντίστοιχες συστάσεις στις δύο επόμενες βαθμίδες από την αναδρομική σχέση :

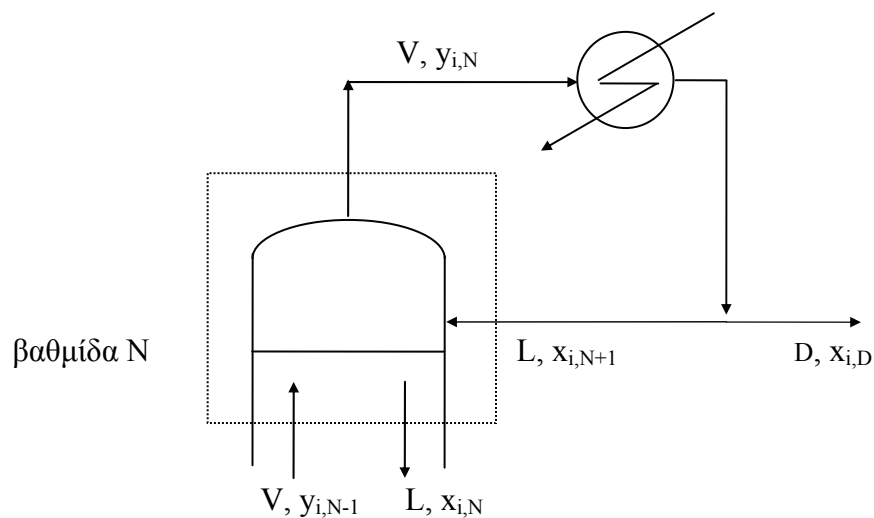
$$x_{i,n} = \left(1 + \frac{L}{K_i V} \right) x_{i,n+1} - \frac{L}{K_i V} x_{i,n+2} \quad n = M+2, M+3, \dots, N-2 \quad (5-26)$$

Για τον υπολογισμό των γραμμομοριακών κλασμάτων του συστατικού i στις βαθμίδες $M+2, M+3, \dots, N-2$ του τμήματος εμπλουτισμού είναι απαραίτητα τα γραμμομοριακά κλάσματα του συστατικού i στις βαθμίδες N και $N-1$.

Έστω ότι ο συμπυκνωτήρας είναι ολικός (σχήμα 5-8). Το ισοζύγιο μάζας για το συστατικό i στην βαθμίδα N εκφράζεται από τη σχέση :

$$y_{i,N-1} V + x_{i,N+1} L = y_{i,N} V + x_{i,N} L \quad (5-27)$$

όπου $x_{i,N+1}$: το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στο υγρό ρεύμα που αφήνει τον συμπυκνωτήρα, αν αυτός είναι ολικός.



Σχήμα 5-8 : Η βαθμίδα N της αποστακτικής στήλης όταν ο συμπυκνωτήρας είναι ολικός.

Επειδή ο συμπυκνωτήρας είναι ολικός, το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στους ατμούς που αφήνουν την βαθμίδα N είναι ίσο με το γραμμομοριακό του κλάσμα στο απόσταγμα και στην αναρροή, δηλαδή :

$$y_{i,N} = x_{i,D} = x_{i,N+1} \quad (5-28)$$

Από την σχέση (5-28) και την εξίσωση ισορροπίας

$$y_{i,N} = K_i x_{i,N}$$

προκύπτει ότι το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στο υγρό ρεύμα που αφήνει την βαθμίδα N , όταν ο συμπυκνωτήρας είναι ολικός, είναι :

$$x_{i,N} = \frac{x_{i,D}}{K_i} \quad (5-29)$$

Από τη σχέση (5-27), την εξίσωση ισορροπίας

$$y_{i,N-1} = K_i x_{i,N-1}$$

και τις εξισώσεις (5-28) και (5-29), προκύπτει ότι το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στο υγρό ρεύμα που αφήνει τη βαθμίδα $N-1$, όταν ο συμπυκνωτήρας είναι ολικός είναι :

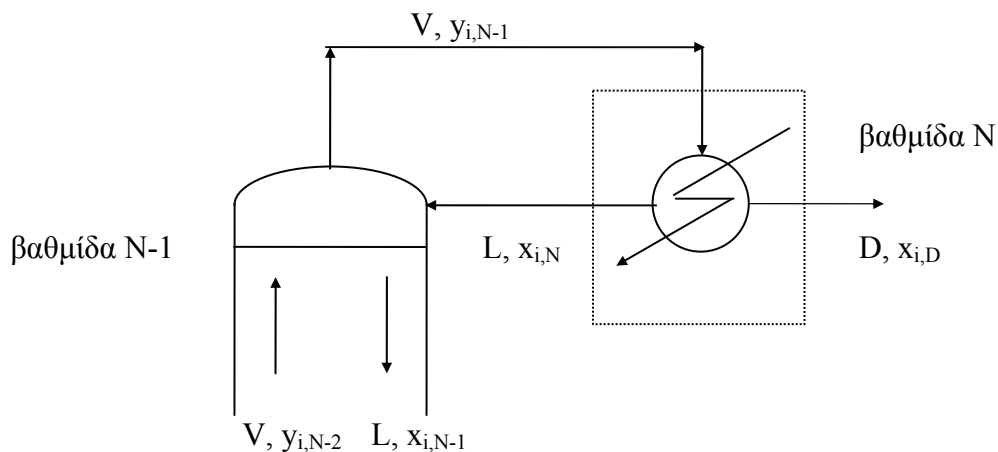
$$x_{i,N-1} = \left(1 + \frac{L}{K_i V} - \frac{L}{V}\right) \frac{x_{i,D}}{K_i} \quad \text{ή}$$

$$x_{i,N-1} = \left[1 + (1 - K_i) \left(\frac{L}{K_i V}\right)\right] \frac{x_{i,D}}{K_i} \quad (5-30)$$

Ας εξετάσουμε την περίπτωση όπου ο συμπυκνωτήρας είναι μερικός (σχήμα 5-9). Το ισοζύγιο μάζας για το συστατικό i στην βαθμίδα N εκφράζεται από τη σχέση :

$$y_{i,N-1} V = y_{i,N} D + x_{i,N} L$$

$$\text{ή} \quad y_{i,N-1} V = y_{i,N} (V - L) + x_{i,N} L \quad (5-31)$$



Σχήμα 5-9 : Οι βαθμίδες $N-1$ και N της αποστακτικής στήλης όταν ο συμπυκνωτήρας είναι μερικός.

Επειδή ο συμπυκνωτήρας είναι μερικός, ισχύει :

$$y_{i,N} = x_{i,D} \quad (5-32)$$

Από την σχέση (5-32) και την εξίσωση ισορροπίας

$$y_{i,N} = K_i x_{i,N}$$

προκύπτει ότι το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στο υγρό ρεύμα που αφήνει την βαθμίδα N , όταν ο συμπυκνωτήρας είναι μερικός, είναι :

$$x_{i,N} = \frac{x_{i,D}}{K_i} \quad (5-33)$$

Από τη σχέση (5-31), την εξίσωση ισοροπίας

$$y_{i,N-1} = K_i x_{i,N-1}$$

και την εξίσωση (5-32), προκύπτει ότι το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στο υγρό ρεύμα που αφήνει τη βαθμίδα $N-1$, όταν ο συμπυκνωτήρας είναι μερικός είναι :

$$x_{i,N-1} = \left[1 + (1 - K_i) \left(\frac{L}{K_i V} \right) \right] \frac{x_{i,D}}{K_i} \quad (5-34)$$

Παρατηρούμε ότι οι σχέσεις (5-29), (5-30) και (5-33), (5-34) στις οποίες καταλήξαμε είναι ίδιες είτε ο συμπυκνωτήρας είναι ολικός είτε είναι μερικός.

Γνωρίζοντας τις εξισώσεις που δίνουν τα $x_{i,N}$ $x_{i,N-1}$ μπορούμε να εξάγουμε μια γενική σχέση για τον υπολογισμό της σύστασης της υγρής φάσης σε κάθε βαθμίδα του τμήματος εμπλουτισμού.

Από την αναδρομική σχέση (5-26)

$$x_{i,n} = \left(1 + \frac{L}{K_i V} \right) x_{i,n+1} - \frac{L}{K_i V} x_{i,n+2} \quad n = M+2, M+3, \dots, N-2$$

για $n = N-2$, προκύπτει :

$$x_{i,N-2} = \left(1 + \frac{L}{K_i V} \right) x_{i,N-1} - \frac{L}{K_i V} x_{i,N} \quad (5-35)$$

Αντικαθιστώντας στην εξίσωση (5-35) το $x_{i,N}$ από τη σχέση (5-29) ή (5-33) και το $x_{i,N-1}$ από την εξίσωση (5-30) ή (5-34), καταλήγουμε στη σχέση :

$$x_{i,N-2} = \left\{ 1 + (1 - K_i) \left[\frac{L}{K_i V} + \left(\frac{L}{K_i V} \right)^2 \right] \right\} \frac{x_{i,D}}{K_i} \quad (5-36)$$

Από τη σχέση (5-26) για $n=N-3$, προκύπτει η εξίσωση μέσω της οποίας υπολογίζεται η σύσταση της υγρής φάσης στη βαθμίδα $N-3$ συναρτήσει των $x_{i,N-2}$ $x_{i,N-1}$ ($i=1,2,\dots,C$). Αντικαθιστώντας τα $x_{i,N-2}$ $x_{i,N-1}$ από τις εξισώσεις (5-36) και (5-30) ή (5-34) αντίστοιχα προκύπτει ότι το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στην υγρή φάση της βαθμίδας $N-3$ είναι :

$$x_{i,N-3} = \left\{ 1 + (1 - K_i) \left[\frac{L}{K_i V} + \left(\frac{L}{K_i V} \right)^2 + \left(\frac{L}{K_i V} \right)^3 \right] \right\} \frac{x_{i,D}}{K_i} \quad (5-37)$$

Οι σχέσεις υπολογισμού των γραμμομοριακών κλασμάτων του συστατικού i στις υπόλοιπες βαθμίδες του τμήματος εμπλουτισμού είναι της ίδιας μορφής. Έτσι, μπορούμε να γράψουμε μία γενική σχέση για το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στη βαθμίδα $(N-p)$ του τμήματος εμπλουτισμού :

$$x_{i,N-p} = \left\{ 1 + (1 - K_i) \sum_{k=1}^p \left(\frac{L}{K_i V} \right)^k \right\} \frac{x_{i,D}}{K_i} \quad p = 2, 3, \dots, M-1 \quad (5-38)$$

Οι όροι του αθροίσματος της σχέσης (5-38) αποτελούν γεωμετρική πρόοδο με πρώτο όρο και λόγο τον

$$\frac{L}{K_i V}$$

Το άθροισμα των p πρώτων όρων αυτής είναι :

$$\sum_{k=1}^p \left(\frac{L}{K_i V} \right)^k = \frac{\frac{L}{K_i V} \left[\left(\frac{L}{K_i V} \right)^p - 1 \right]}{\left(\frac{L}{K_i V} \right) - 1} = \frac{\left[\left(\frac{L}{K_i V} \right)^{p+1} - \frac{L}{K_i V} \right]}{\left(\frac{L}{K_i V} \right) - 1}$$

Συνεπώς καταλήγουμε στην παρακάτω γενική σχέση για τον υπολογισμό του γραμμομοριακού κλάσματος του συστατικού i του υγρού ρεύματος που αφήνει τη βαθμίδα $N-p$ στο τμήμα εμπλουτισμού :

$$x_{i,N-p} = \left\{ 1 + (1 - K_i) \left[\frac{\left[\left(\frac{L}{K_i V} \right)^{p+1} - \frac{L}{K_i V} \right]}{\frac{L}{K_i V} - 1} \right] \right\} \frac{x_{i,D}}{K_i} \quad p=1, 2, \dots, N-M+2 \quad (5-39)$$

Για την ευχερέστερη εφαρμογή της σχέσης υπολογισμού της σύστασης του υγρού ρεύματος που αφήνει τη βαθμίδα n , θέτουμε στην παραπάνω σχέση όπου $N-p$ το n . Επίσης ορίζουμε τον παράγοντα εξάντλησης στο άνω τμήμα της αποστακτικής στήλης ως

$$S_{n,i} = \frac{K_i V}{L} \quad (5-40)$$

Έτσι, το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στο υγρό ρεύμα που αφήνει τη βαθμίδα n στο τμήμα εμπλουτισμού είναι :

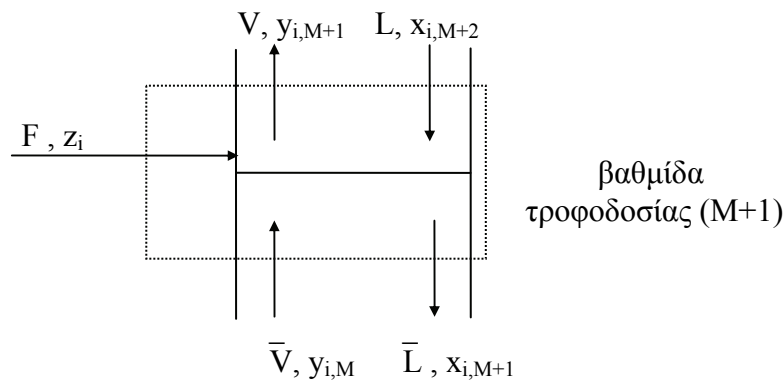
$$x_{i,n} = \left\{ 1 + (1 - K_i) \left[\frac{\left[\left(\frac{1}{S_{n,i}} \right)^{N+1-n} - \frac{1}{S_{n,i}} \right]}{\frac{1}{S_{n,i}} - 1} \right] \right\} \frac{x_{i,D}}{K_i} \quad n = M+2, \dots, N-1 \quad (5-41)$$

Η απόδειξη ισχύος του γενικού τύπου που περιγράφει η εξίσωση (5-41) μπορεί να γίνει επαγωγικά όπως έγινε και στην αντίστοιχη σχέση για το τμήμα εξάντλησης (παράρτημα 1).

5.2.4 Ισοζύγιο μάζας στη βαθμίδα τροφοδοσίας

Θεωρώντας ότι το ρεύμα τροφοδοσίας αναμιγνύεται με τα ρευστά της βαθμίδας τροφοδοσίας πριν οποιοσδήποτε διαχωρισμός συμβεί (παράγραφος 5.1.4), το ισοζύγιο μάζας του συστατικού i στη βαθμίδα τροφοδοσίας (σχήμα 5-10) εκφράζεται από την εξίσωση :

$$Fz_i + y_{i,M} \bar{V} + x_{i,M+2} L = y_{i,M+1} V + x_{i,M+1} \bar{L} \quad (5-42)$$



Σχήμα 5-10 : Βαθμίδα τροφοδοσίας αποστακτικής στήλης.

Συνδυάζοντας την σχέση (5-42) με τις εξισώσεις ισορροπίας,

$$\begin{aligned} y_{i,M} &= \bar{K}_i x_{i,M} \\ y_{i,M+1} &= K_{i,M+1} x_{i,M+1} \end{aligned}$$

όπου $K_{i,M+1}$: ο λόγος ισορροπίας του συστατικού i στη βαθμίδα τροφοδοσίας

προκύπτει ότι το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στο υγρό ρεύμα που αφήνει τη βαθμίδα τροφοδοσίας (M+1) είναι :

$$x_{i,M+1} = \frac{F}{\bar{L} + K_{i,M+1}V} z_i + \frac{L}{\bar{L} + K_{i,M+1}V} x_{i,M+2} + \frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L} + K_{i,M+1}V} x_{i,M} \quad (5-43)$$

Η βαθμίδα M+2 ανήκει στο τμήμα εμπλουτισμού, οπότε το γραμμομοριακό κλάσμα $x_{i,M+2}$ υπολογίζεται με βάση τη σχέση (5-41), ενώ η βαθμίδα M στο τμήμα εξάντλησης, οπότε το $x_{i,M}$ υπολογίζεται από την εξίσωση (5-23).

5.3 Εξαγωγή της απλοποιημένης εξίσωσης

Παρακάτω περιγράφεται ο τρόπος εξαγωγής της αλγεβρική εξίσωσης που συνδέει τη σύσταση της τροφοδοσίας και αυτή των προϊόντων με τον αριθμό των θεωρητικών βαθμίδων της στήλης και τη θέση τροφοδοσίας.

Το ισοζύγιο μάζας για το συστατικό i στα όρια του σχήματος 5-11, δηλαδή μεταξύ πυθμένα και τελευταίας βαθμίδας (M) του τμήματος εξάντλησης, εκφράζεται από την εξίσωση :

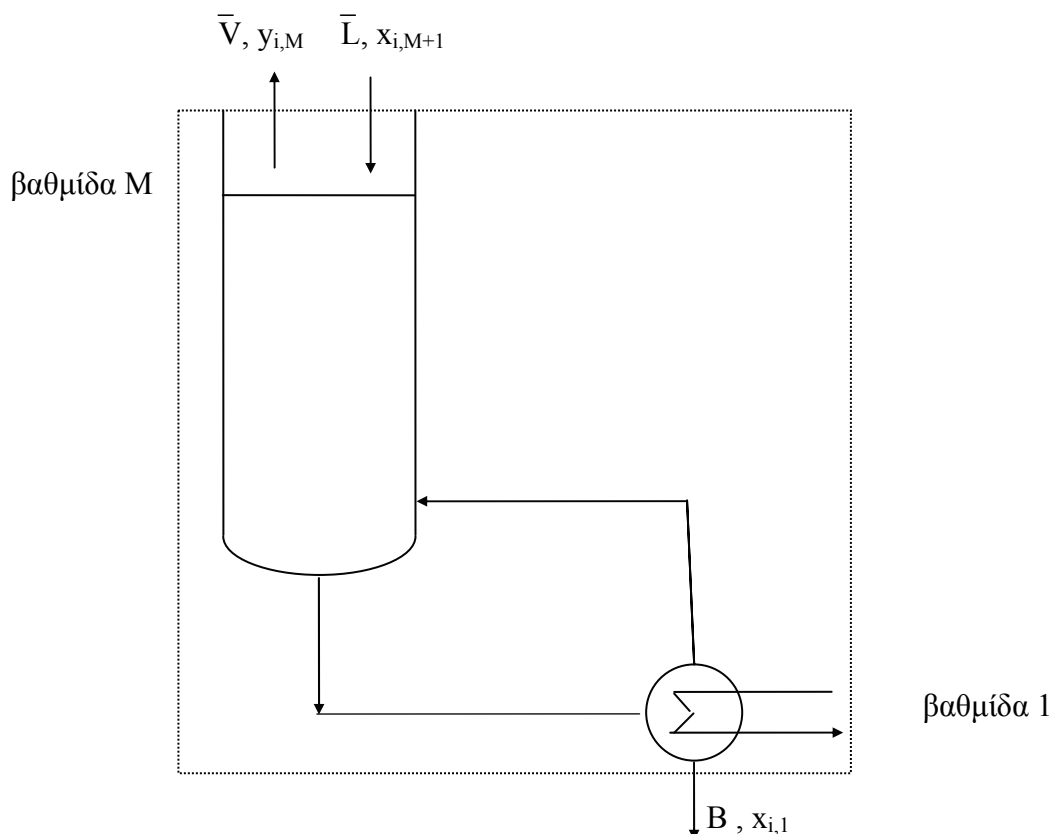
$$x_{i,M+1} \bar{L} = y_{i,M} \bar{V} + x_{i,B} B \quad (5-44)$$

Στην εξίσωση (5-44) καταλήγουμε και στην περίπτωση που ο αναβραστήρας είναι ολικός. Από την εξίσωση (5-44) και από τη σχέση ισορροπίας

$$y_{i,M} = \bar{K}_i x_{i,M}$$

προκύπτει ότι

$$x_{i,M+1} = \left(\frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}} \right) x_{i,M} + \left(\frac{B}{\bar{L}} \right) x_{i,B} \quad (5-45)$$



Σχήμα 5-11 : Τμήμα εξάντλησης της αποστακτικής στήλης (ο αναβραστήρας είναι μερικός).

Αν στην εξίσωση (5-43) αντικαταστήσουμε το $x_{i,M+1}$ από την εξίσωση (5-45), το $x_{i,M}$ από την εξίσωση (5-23) και το $x_{i,M+2}$ από την εξίσωση (5-41), και χρησιμοποιώντας το ισοζύγιο μάζας για το συστατικό i στα όρια της αποστακτικής στήλης προκύπτει η σχέση (5-46). Αυτή συνδέει το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στην τροφοδοσία και στο υπόλειμμα με τον αριθμό των θεωρητικών βαθμίδων της στήλης και τη θέση της βαθμίδας τροφοδοσίας.

$$\frac{B x_{i,B}}{F z_i} = \frac{(1 - S_{n,i}^{N-M}) + R(1 - S_{n,i})}{(1 - S_{n,i}^{N-M}) + R(1 - S_{n,i}) + h_i S_{n,i}^{N-M} \left[1 - S_{m,i}^{M+1} \left(\frac{\bar{K}_i - 1}{\bar{K}_i - S_{m,i}} \right) \right]} \quad (5-46)$$

όπου

$$h_i = \frac{K_{i,M+1}}{K_i} \left[\frac{L(1 - S_{n,i})}{\bar{L}(1 - S_{m,i})} \right] \quad (5-47)$$

$$S_{m,i} = \frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}} \text{ ο παράγοντας εξάντλησης στο κάτω τμήμα της στήλης.}$$

$$S_{n,i} = \frac{K_i V}{L} \text{ ο παράγοντας εξάντλησης στο άνω τμήμα της στήλης.}$$

$$R = \frac{L}{D} \text{ ο εξωτερικός λόγος αναρροής της στήλης.}$$

$$\frac{B x_{i,B}}{F z_i} = r_{i,B} \text{ η ανάκτηση του συστατικού } i \text{ στο υπόλειμμα.}$$

και

- \bar{K}_i : ο φαινόμενος λόγος ισορροπίας του συστατικού i στο τμήμα εξάντλησης.
- K_i : ο φαινόμενος λόγος ισορροπίας του συστατικού i στο τμήμα εμπλουτισμού.
- $K_{i,M+1}$: ο λόγος ισορροπίας του συστατικού i στη βαθμίδα τροφοδοσίας $(M+1)$.
- F : η γραμμομοριακή παροχή του ρεύματος τροφοδοσίας (kmoles/h).
- B : η γραμμομοριακή παροχή υπολείμματος (kmoles/h).
- D : η γραμμομοριακή παροχή αποστάγματος (kmoles/h).
- L : η γραμμομοριακή παροχή υγρού στο τμήμα εμπλουτισμού της αποστακτικής στήλης (kmoles/h).
- \bar{L} : η γραμμομοριακή παροχή υγρού στο τμήμα εξάντλησης της αποστακτικής στήλης (kmoles/h).
- V : η γραμμομοριακή παροχή ατμών στο τμήμα εμπλουτισμού της αποστακτικής στήλης (kmoles/h).
- \bar{V} : η γραμμομοριακή παροχή ατμών στο τμήμα εξάντλησης της αποστακτικής στήλης (kmoles/h).

Η απόδειξη της εξίσωσης (5-46) γίνεται μέσω του μαθηματικού προγράμματος DERIVE 3.0 και ο τρόπος με τον οποίο προκύπτει παρουσιάζεται αναλυτικότερα στο παράρτημα 2.

5.4 Εφαρμογές - Παρατηρήσεις

1. Η απλοποιημένη αλγεβρική εξίσωση υπολογισμού των ανακτήσεων των συστατικών στο υπόλειμμα [σχέση (5-46)] εφαρμόζεται ευκολότερα στην περίπτωση που αντιμετωπίζεται πρόβλημα λειτουργίας σε μόνιμη κατάσταση μιας εγκατεστημένης στήλης. Ένα από τα σύνολα προδιαγραφών που διευκολύνει την εφαρμογή της αποτελείται από τις παρακάτω μεταβλητές :

α) τον αριθμό των θεωρητικών βαθμίδων της αποστακτικής στήλης, N . Στις θεωρητικές βαθμίδες περιλαμβάνεται, αν υπάρχει, ο μερικός αναβραστήρας και ο μερικός συμπυκνωτήρας.

β) τον αριθμό των θεωρητικών βαθμίδων κάτω από τη βαθμίδα τροφοδοσίας, M . Στον αριθμό M συνυπολογίζεται και ο μερικός αναβραστήρας, αν υπάρχει.

γ) την παροχή αναρροής, L .

δ) τη γραμμομοριακή ροή αποστάγματος, D .

ε) τις μεταβλητές περιγραφής της τροφοδοσίας της αποστακτικής στήλης, όπως η γραμμομοριακή ροή, F , η σύσταση της, z_i , και η θερμική της κατάσταση, q .

Με βάση τις προδιαγραφές (γ), (δ), (ε) και το ολικά ισοζύγια μάζας στη βαθμίδα τροφοδοσίας και στα όρια της αποστακτικής στήλης υπολογίζονται οι γραμμομοριακές ροές σε κάθε τμήμα της αποστακτικής στήλης (οι οποίες έχουν θεωρηθεί σταθερές). Έτσι, ο προσδιορισμός των παραγόντων εξάντλησης $S_{n,i}$ και $S_{m,i}$ και των παραμέτρων h_i της σχέσης 5-46 έγκειται στον υπολογισμό των φαινόμενων λόγων ισορροπίας.

Η πίεση στην αποστακτική στήλη θεωρείται ότι παραμένει σταθερή. Έτσι, ο υπολογισμός των φαινόμενων λόγων ισορροπίας κάθε τμήματος, K_i και \bar{K}_i , αν θεωρήσουμε ότι εξαρτώνται μόνο από τη θερμοκρασία και την πίεση (αυτή η προσέγγιση ακολουθείται στην παρούσα εργασία), ανάγεται στην επιλογή κατάλληλης θερμοκρασίας για κάθε τμήμα, της λεγόμενης φαινόμενης θερμοκρασίας του τμήματος.

Η απλούστερη φαινόμενη θερμοκρασία για το τμήμα εμπλουτισμού, $T_{n,\phi}$, είναι ο αριθμητικός μέσος της θερμοκρασίας της τελευταίας βαθμίδας της στήλης, T_N , και της θερμοκρασίας της ζώνης τροφοδοσίας, T_{FZ} .

$$T_{n,\phi} = \frac{T_N + T_{FZ}}{2} \quad (5-48)$$

Η θερμοκρασία ζώνης τροφοδοσίας ορίζεται ως η μέση θερμοκρασία της ζώνης γύρω από τη βαθμίδα τροφοδοσίας.

Με παρόμοιο τρόπο ορίζεται και η φαινόμενη θερμοκρασία για το τμήμα εξάντλησης, $T_{m,\phi}$, ως ο αριθμητικός μέσος της θερμοκρασίας της πρώτης βαθμίδας της στήλης, T_1 , και της θερμοκρασίας της ζώνης τροφοδοσίας, T_{FZ} .

$$T_{m,\phi} = \frac{T_1 + T_{FZ}}{2} \quad (5-49)$$

Στη θερμοκρασία της ζώνης τροφοδοσίας υπολογίζονται και οι λόγοι ισορροπίας στη βαθμίδα τροφοδοσίας $K_{i,M+1}$.

Ο αλγόριθμος που ακολουθείται για τον τελικό υπολογισμό των ανακτήσεων κρίνεται σκόπιμο να περιγραφεί, όταν ολοκληρωθεί η παρουσίαση του μαθηματικού προτύπου, στο κεφάλαιο 6. Τότε αναλύεται και η σημασία (έννοια) της θερμοκρασίας ζώνης τροφοδοσίας.

2. Τα γραμμομοριακά κλάσματα που προκύπτουν από τις εξισώσεις (5-23), (5-41) και (5-43) δεν είναι κανονικοποιημένα.

Το ισοζύγιο μάζας του συστατικού i σε τυπική βαθμίδα $m-1$ στο τμήμα εξάντλησης οδηγεί στη σχέση (5-10) :

$$x_{i,m} = \left(1 + \frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}}\right) x_{i,m-1} - \left(\frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}}\right) x_{i,m-2} \quad m = 3,4,\dots,M, \quad i=1,2,\dots,C$$

όπου m : ο αύξων αριθμός βαθμίδας στο τμήμα εξάντλησης

C : ο αριθμός των συστατικών του μίγματος

Επομένως :

$$\sum_{i=1}^C x_{i,m} = \sum_{i=1}^C x_{i,m-1} + \frac{\bar{V}}{\bar{L}} \sum_{i=1}^C \bar{K}_i x_{i,m-1} - \frac{\bar{V}}{\bar{L}} \sum_{i=1}^C \bar{K}_i x_{i,m-2} \quad (5-50)$$

Παρατηρούμε ότι το άθροισμα των γραμμομοριακών κλασμάτων στην υγρή φάση σε βαθμίδα του τμήματος εξάντλησης εξαρτάται από τα αθροίσματα :

$$\sum_{i=1}^C x_{i,m-1}, \quad \sum_{i=1}^C \bar{K}_i x_{i,m-1} \quad \text{και} \quad \sum_{i=1}^C \bar{K}_i x_{i,m-2}$$

και το λόγο $\frac{\bar{V}}{\bar{L}}$

Αν ο λόγος της γραμμομοριακής ροής ατμών προς τη γραμμομοριακή ροή υγρού είναι στην πράξη σταθερός και η παραδοχή σταθερών λόγων ισορροπίας ικανοποιητική, τότε το άθροισμα των γραμμομοριακών κλασμάτων σε κάθε βαθμίδα, όπως αυτά δίδονται από τις εξισώσεις (5-23), (5-41) και (5-43) πλησιάζει τη μονάδα.

3. Η χρησιμότητα των σχέσεων υπολογισμού των γραμμομοριακών κλασμάτων της υγρής φάσης σε κάθε βαθμίδα της αποστακτικής στήλης δεν περιορίζεται μόνο στην εξαγωγή της απλοποιημένης σχέσης (5-46) που συνδέει τη σύσταση υπολείμματος και τροφοδοσίας με τον αριθμό των θεωρητικών βαθμίδων και τη θέση της βαθμίδας τροφοδοσίας. Οι σχέσεις (5-23), (5-41) και (5-43) μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τον υπολογισμό του σημείου φυσαλίδας των υγρών ρευμάτων που αφήνουν τις βαθμίδες της αποστακτικής στήλης, δηλαδή της θερμοκρασίας σε κάθε βαθμίδα.

Βέβαια, πριν τον υπολογισμό των σημείων φυσαλίδας θα πρέπει τα γραμμομοριακά κλάσματα που προκύπτουν από τις εξισώσεις (5-23), (5-41) και (5-43) να κανονικοποιηθούν.

Ο Rice (Rice, 1984) σε σχετική δημοσίευσή του αναφέρει ότι η κανονικοποίηση δίνει ικανοποιητικά αποτελέσματα όσο η παραδοχή σταθερών γραμμομοριακών ροών εντός του ίδιου τμήματος της αποστακτικής στήλης δεν παραβιάζεται χονδροειδώς στην πράξη.

4. Η απλοποιημένη εξίσωση (5-46) εφαρμόζεται ευκολότερα στο ευθύ πρόβλημα από στο πρόβλημα σχεδιασμού, όπως αναφέρθηκε. Για την επίλυση προβλημάτων σχεδιασμού νέων στηλών περισσότερο βολική είναι η μέθοδος FUG.

Με τη μέθοδο FUG και σύμφωνα με την εξίσωση Kirkbride [εξίσωση (4-10)] προσδιορίζεται η βέλτιστη θέση τροφοδοσίας και αυτή θεωρείται και η πραγματική θέση. Έτσι, με τη FUG, δεν μπορεί κάποιος να μελετήσει τις επιπτώσεις στην ποιότητα του διαχωρισμού και τη λειτουργία της στήλης μιας λανθασμένης επιλογής της θέσης τροφοδοσίας. Με την απλοποιημένη εξίσωση που προτείνεται διαχωρίζεται η έννοια της πραγματικής από τη βέλτιστη βαθμίδα τροφοδοσίας.

Η μέθοδος που προτείνεται χρησιμοποιεί φαινόμενες τιμές για τους λόγους ισορροπίας διαφορετικές για κάθε τμήμα της αποστακτικής στήλης. Αυτό αποτελεί ένα πλεονέκτημα σε σχέση με τη μέθοδο FUG, που χρησιμοποιεί μία φαινόμενη τιμή για όλη τη στήλη, ειδικά σε περιπτώσεις μιγμάτων στα οποία το εύρος μεταβολής των σχετικών πτητικοτήτων από τον πυθμένα στην κορυφή της στήλης είναι σχετικά μεγάλο.

5. Η απλοποιημένη σχέση που αναπτύσσεται εμφανίζει ομοιότητες με τη μέθοδο Smith-Brinkley, που περιγράφηκε στην παράγραφο 4.3. Αυτό διαπιστώνει κάποιος που παρατηρεί τις εξισώσεις (5-46) και (4-11).

Εντούτοις, η βασική εξίσωση των δύο μεθόδων διαφοροποιείται ελαφρά. Επίσης, υπάρχει διαφορά στον ορισμό της παραμέτρου h_i [εξίσωση (5-47) και εξισώσεις (4-14), (4-15)]. Τέλος, η θερμοκρασία της βαθμίδας τροφοδοσίας της μεθόδου SB, έχει δώσει τη θέση στη θερμοκρασία ζώνης τροφοδοσίας στη νέα μέθοδο. Η μέθοδος SB αγνοεί οποιαδήποτε πιθανή διαφορά μεταξύ της σύστασης των ατμών κορυφής και της αναρροής, αποτέλεσμα να μπορεί να εφαρμοστεί αυστηρά μόνο όταν ο συμπυκνωτήρας είναι ολικός. Κάτι τέτοιο δεν ισχύει στην προτεινόμενη μέθοδο.

Οι λόγοι για τους οποίους αναπτύχθηκε μία νέα εξίσωση και δεν χρησιμοποιήθηκε η SB είναι οι εξής :

- α) Ο στόχος δεν ήταν μόνο μία απλοποιημένη σχέση υπολογισμού των ανακτήσεων, αλλά και ο προσεγγιστικός προσδιορισμός της κατανομής της θερμοκρασίας και, σε ειδικές περιπτώσεις, της σύστασης στο εσωτερικό της στήλης.

- β) Δεν μπορούμε να γνωρίζουμε όλες τις παραδοχές που έγιναν για την εξαγωγή της βασικής εξίσωσης της SB, οι οποίες είναι σημαντικές για τα όρια εφαρμογής της και την αξιολόγηση των αποτελεσμάτων της. Για παράδειγμα, δεν διευκρινίζεται τι συμβαίνει στο μίγμα του ρεύματος τροφοδοσίας : αναμιγνύεται με τα ρευστά της βαθμίδας τροφοδοσίας πριν από οποιαδήποτε διαχωρισμό ή διαχωρίζεται στις φάσεις του πριν αναμιχθεί με το μίγμα της στήλης.

6. Η εξίσωση υπολογισμού του γραμμομοριακού κλάσματος του συστατικού i π.χ στη βαθμίδα m του τμήματος εξάντλησης [εξίσωση (5-23)], όπως φαίνεται και από τον τρόπο εξαγωγής της, είναι έκφραση του ισοζυγίου μάζας του συστατικού i , στα όρια της πρώτης βαθμίδας και της βαθμίδας $m-1$.

7. Παρατηρώντας τις εξισώσεις (5-23), (5-41) και (5-43), οι απαραίτητες πληροφορίες για τον υπολογισμό των γραμμομοριακών κλασμάτων άρα και των θερμοκρασιών σε κάθε βαθμίδα είναι οι εξής :

α) η σύσταση αποστάγματος και η σύσταση υπολείμματος.

β) οι γραμμομοριακές ροές ατμών και υγρού στα δύο τμήματα της αποστακτικής στήλης.

γ) οι τιμές των φαινόμενων λόγων ισορροπίας των συστατικών για κάθε τμήμα της αποστακτικής στήλης.

δ) ο αριθμός θεωρητικών βαθμίδων της αποστακτικής στήλης και η θέση τροφοδοσίας.

Σημειώνεται ότι ο προσδιορισμός της κατανομής θερμοκρασίας στο εσωτερικό της αποστακτικής στήλης είναι δυνατό να γίνει αυτόνομος, ανεξάρτητος της εξίσωσης (5-46) υπολογισμού των ανακλήσεων στο υπόλειμμα. Αρκεί βέβαια να καθοριστούν οι απαραίτητες πληροφορίες.

6

Το μαθηματικό πρότυπο της διεργασίας

Στο παρόν κεφάλαιο, αφού σημειωθούν οι παραδοχές που γίνονται, παρουσιάζεται ολοκληρωμένο το μαθηματικό πρότυπο της διεργασίας απόσταξης όπως αυτή καθορίστηκε στην παράγραφο 4.1. Ακολουθεί ο προσδιορισμός των βαθμών ελευθερίας του προτύπου. Τέλος, αφού καθοριστεί το σύνολο των προδιαγραφών, δηλαδή το πρόβλημα, προτείνεται ένας αλγόριθμος επίλυσής του.

6.1 Η διεργασία

Πριν την παράθεση των εξισώσεων περιγραφής της διεργασίας, είναι απαραίτητο αυτή να προσδιοριστεί με ακρίβεια. Έτσι, το παρακάτω μαθηματικό πρότυπο που αναπτύσσεται αναφέρεται σε διαχωρισμό μίγματος ελαφρών υδρογονανθράκων σε αποστακτική στήλη με θεωρητικές βαθμίδες με μία τροφοδοσία και χωρίς πλάγια προϊόντα. Ο αναβραστήρας της στήλης είναι είτε ολικός είτε μερικός, όπως και ο συμπυκνωτήρας. Οι συνθήκες διεξαγωγής της διεργασίας είναι μόνιμες.

6.2 Παραδοχές προσέγγισης της διεργασίας

Η ακριβής μαθηματική περιγραφή μιας διεργασίας στις περισσότερες περιπτώσεις δεν είναι δυνατή, ενώ σε άλλες δεν είναι επιθυμητή λόγω της πολυπλοκότητας υπολογισμών που συνεπάγεται. Οι παραδοχές είτε καθιστούν δυνατή την περιγραφή μιας διεργασίας, είτε απλοποιούν τους υπολογισμούς. Το σύνολο εξισώσεων του μαθηματικού προτύπου που αναπτύσσεται συνοδεύεται από τις παρακάτω παραδοχές προσέγγισης της διεργασίας, οι οποίες σχολιάστηκαν στην παράγραφο 5.1.

- A. Η πίεση λειτουργίας της αποστακτικής στήλης θεωρείται σταθερή σε όλο το ύψος της.
- B. Οι σχετικές πτητικότητες παραμένουν σταθερές σε κάθε τμήμα (εμπλουτισμού και εξάντλησης) της στήλης.
- Γ. Η γραμμομοριακή ροή των ατμών στο ίδιο τμήμα της αποστακτικής στήλης (εμπλουτισμού και εξάντλησης) θεωρείται σταθερή. Με βάση αυτή την παραδοχή και το ισοζύγιο μάζας σε μια τυπική βαθμίδα της αποστακτικής στήλης προκύπτει ότι και η γραμμομοριακή ροή του υγρού παραμένει σταθερή στο ίδιο τμήμα. (απόδειξη στην παράγραφο 5.1.1)
- Δ. Η αναρροή είναι κορεσμένο υγρό, όταν ο συμπυκνωτήρας είναι ολικός. Επίσης, οι ατμοί που εξέρχονται από τον αναβραστήρα όταν αυτός είναι ολικός είναι σε κατάσταση κορεσμού.
- E. Το ρεύμα τροφοδοσίας αναμιγνύεται με τα ρευστά της βαθμίδας τροφοδοσίας πριν από οποιοδήποτε διαχωρισμό.

6.3 Μαθηματικό πρότυπο της διεργασίας

Το μαθηματικό πρότυπο που χρησιμοποιείται στην παρούσα εργασία χωρίζεται σε 3 σύνολα εξισώσεων, τα οποία φαίνονται στους πίνακες 6-1, 6-2, 6-3 αντίστοιχα. Στην πρώτη στήλη των πινάκων είναι ο αριθμός των εξισώσεων (A.E), στη δεύτερη ο αύξων αριθμός της εξίσωσης (α.α), στην τέταρτη και πέμπτη στήλη οι μεταβλητές που εμφανίζονται για πρώτη φορά σε εξίσωση (M) και το πλήθος τους (A.M).

Στο πρώτο σύνολο εξισώσεων, υπάρχουν οι εξισώσεις υπολογισμού των ανακτήσεων των συστατικών στο υπόλειμμα. Στο δεύτερο σύνολο περιέχονται οι απλοποιημένες εξισώσεις υπολογισμού της θερμοκρασίας σε κάθε βαθμίδα της αποστακτικής στήλης. Το τρίτο σύνολο περιλαμβάνει τις εξισώσεις υπολογισμού των φορτίων του αναβραστήρα και του συμπυκνωτήρα.

Πίνακας 6-1 : Πρώτο σύνολο εξισώσεων του μαθηματικού προτύπου.

A.E	a.a	Εξισώσεις	M	A.M
1	1	$\sum_{i=1}^C z_i = 1$	z_i	C
1	2	$\sum_{i=1}^C x_{i,B} = 1$	$x_{i,B}$	C
1	3	$F = B + D$	F,B,D	3
C	4i	$z_i F = B x_{i,B} + D x_{i,D}$	$x_{i,D}$	C
1	5	$V = L + D$	V,L	2
1	6	$\bar{L} = B + \bar{V}$	\bar{L}, \bar{V}	2
1	7	$\bar{L} = L + qF$	q	1
1	8	$R = L/D$	R	1
1	9	αν ο συμπυκνωτήρας είναι ολικός $\sum_{i=1}^C x_{i,D} K_i(P, T_D) = 1$ αν ο συμπυκνωτήρας είναι μερικός $\sum_{i=1}^C \frac{x_{i,D}}{K_i(P, T_D)} = 1$	P, T _D	2
C	10i	$y_{i,N} = x_{i,D}$	$y_{i,N}$	C

1	11	$\sum_{i=1}^C \frac{y_{i,N}}{K_i(P, T_N)} = 1$	T_N	1
1	12	$\sum_{i=1}^C x_{i,B} K_i(P, T_1) = 1$	T_1	1
1	13	$T_{n,\varphi} = \frac{T_N + T_{FZ}}{2}$	$T_{n,\varphi}, T_{FZ}$	2
1	14	$T_{m,\varphi} = \frac{T_1 + T_{FZ}}{2}$	$T_{m,\varphi}$	1
C	15i	$S_{n,i} = \frac{K_i V}{L}$	$S_{n,i}$	C
C	16i	$S_{m,i} = \frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}}$	$S_{m,i}$	C
C	17i	$h_i = \frac{K_{i,M+1}}{K_i} \left[\frac{L(1 - S_{n,i})}{\bar{L}(1 - S_{m,i})} \right]$	h_i	C
C	18i	$r_{i,B} = \frac{(1 - S_{n,i}^{N-M}) + R(1 - S_{n,i})}{(1 - S_{n,i}^{N-M}) + R(1 - S_{n,i}) + h_i S_{n,i}^{N-M} \left[1 - S_{m,i}^{M+1} \left(\frac{\bar{K}_i - 1}{\bar{K}_i - S_{m,i}} \right) \right]}$	$N, M, r_{i,B}$	C+2
C	19i	$r_{i,B} = \frac{B x_{i,B}}{F z_i}$	---	0

Πίνακας 6-2 : Δεύτερο σύνολο εξισώσεων του μαθηματικού προτύπου.

A.E	α.α	Εξισώσεις	M	A.M
C(M-1)	20im		$x_{i,m}$	C(M-1)

		$x_{i,m} = \left\{ 1 + \left(1 - \frac{1}{\bar{K}_i} \right) \left[\frac{S_{m,i}^m - S_{m,i}}{S_{m,i} - 1} \right] \right\} x_{i,B}$		
C[(N-1)-(M+1)]	21in	$x_{i,n} = \left\{ 1 + (1 - K_i) \left[\frac{\left(\frac{1}{S_{n,i}} \right)^{N+1-n} - \frac{1}{S_{n,i}}}{\frac{1}{S_{n,i}} - 1} \right] \right\} \frac{x_{i,D}}{K_i}$	$x_{i,n}$	C[(N-1)-(M+1)]
C	22i	$x_{i,N} = \frac{y_{i,N}}{K_i(P, T_N)}$	$x_{i,N}$	C
C	23i	$x_{i,M+1} = \frac{F}{\bar{L} + K_{i,M+1} \bar{V}} z_i + \frac{L}{\bar{L} + K_{i,M+1} \bar{V}} x_{i,M+2} + \frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L} + K_{i,M+1} \bar{V}} x_{i,M}$	$x_{i,M+1}$	C
N-2	24k	$\sum_{i=1}^C x_{i,k} K_i(P, T_k) = 1$	T_k	N-2

Πίνακας 6-3 : Τρίτο σύνολο εξισώσεων του μαθηματικού προτύπου.

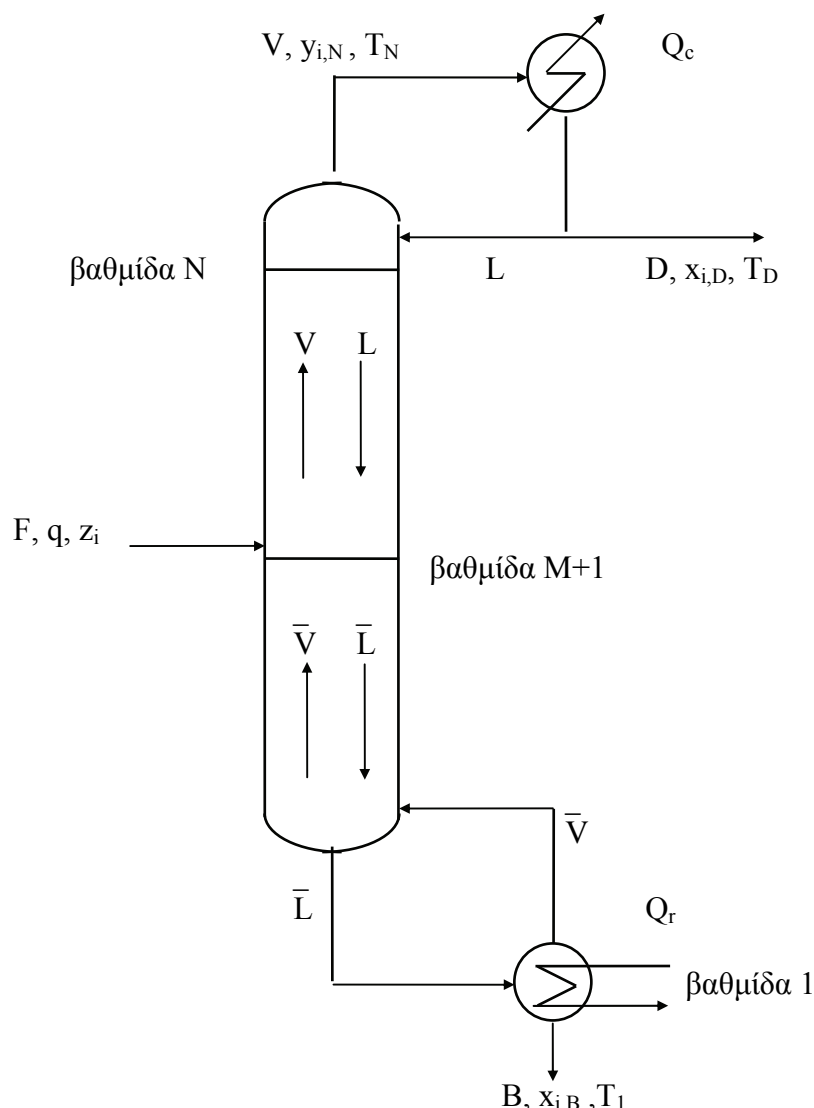
A.E	a.a	Εξισώσεις	M	A.M
C	25i	αν ο συμπυκνωτήρας είναι μερικός $y_{i,N-1} = K_i(P, T_{N-1}) x_{i,N-1}$	$y_{i,N-1}$	C
C	26i	αν ο αναβραστήρας είναι μερικός $y_{i,1} = K_i(P, T_1) x_{i,B}$	$y_{i,1}$	C
1	27	αν ο αναβραστήρας είναι ολικός $\sum_{i=1}^C \frac{x_{i,B}}{K_i(P, T_0)} = 1$	T_0	1
1	28	αν ο συμπυκνωτήρας είναι ολικός $Q_c = E_1 \{V[h_V(y_{i,N}, T_N) - h_L(x_{i,D}, T_D)]\}$ αν ο συμπυκνωτήρας είναι μερικός $Q_c = E_1 \{Vh_V(y_{i,N-1}, T_{N-1}) - Dh_V(x_{i,D}, T_D) - Lh_L[x_{i,N},$	Q_c	1

		$T_D \}$		
1	29	<p>αν ο αναβραστήρας είναι ολικός $Q_r = E_1 \{ \bar{V} [h_V(x_{i,B}, T_0) - h_L(x_{i,B}, T_1)] \}$</p> <p>αν ο αναβραστήρας είναι μερικός $Q_r = E_1 \{ \bar{V} h_V(y_{i,1}, T_1) + B h_L(x_{i,B}, T_1) - \bar{L} h_L(x_{i,2}, T_2) \}$</p>	Q_r	1

- όπου C : ο αριθμός των συστατικών του προς διαχωρισμό μίγματος.
N : ο συνολικός αριθμός των θεωρητικών βαθμίδων της αποστακτικής στήλης (περιλαμβάνει μερικό αναβραστήρα και μερικό συμπυκνωτήρα).
M : ο αριθμός των θεωρητικών βαθμίδων κάτω από τη βαθμίδα τροφοδοσίας (περιλαμβάνει μερικό αναβραστήρα).
n : αύξων αριθμός θεωρητικής βαθμίδας στο τμήμα εμπλουτισμού (κυμαίνεται από M+1 έως N-1).
m : αύξων αριθμός θεωρητικής βαθμίδας στο τμήμα εξάντλησης (κυμαίνεται από 2 έως M).
- z_i : το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στο ρεύμα τροφοδοσίας.
 $x_{i,B}$: το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στο υπόλειμμα.
 $x_{i,D}$: το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στο απόσταγμα.
 $x_{i,m}$: το γραμμομοριακό κλάσμα στην υγρή φάση του συστατικού i στη βαθμίδα m (η οποία βρίσκεται στο τμήμα εξάντλησης).
 $x_{i,n}$: το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στην υγρή φάση στη βαθμίδα n (η οποία βρίσκεται στο τμήμα εμπλουτισμού).
 $y_{i,k}$: το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στο ρεύμα ατμών που αφήνει τη βαθμίδα k.
- q : η θερμική κατάσταση τροφοδοσίας.
R : ο (εξωτερικός) λόγος αναρροής της αποστακτικής στήλης.
- F : η γραμμομοριακή παροχή τροφοδοσίας της αποστακτικής στήλης (kmoles/h).
B : η γραμμομοριακή παροχή υπολείμματος της αποστακτικής στήλης (kmoles/h).
D : η γραμμομοριακή παροχή αποστάγματος της αποστακτικής στήλης (kmoles/h).
L : η γραμμομοριακή παροχή του υγρού στο τμήμα εμπλουτισμού της αποστακτικής στήλης (kmoles/h).
V : η γραμμομοριακή παροχή των ατμών στο τμήμα εμπλουτισμού της αποστακτικής στήλης (kmoles/h).
 \bar{L} : η γραμμομοριακή παροχή του υγρού στο τμήμα εξάντλησης της αποστακτικής στήλης (kmoles/h).
 \bar{V} : η γραμμομοριακή παροχή των ατμών στο τμήμα εξάντλησης της αποστακτικής στήλης (kmoles/h).
- P : η πίεση λειτουργίας της αποστακτικής στήλης (atm).
 T_D : η θερμοκρασία του αποστάγματος (K).

- T_k : η θερμοκρασία της βαθμίδας k της αποστακτικής στήλης (K).
 T_{FZ} : η θερμοκρασία της ζώνης τροφοδοσίας της αποστακτικής στήλης (K).
 T_0 : η θερμοκρασία του μίγματος ατμών που αφήνει τον αναβραστήρα όταν αυτός είναι ολικός (K).
 $T_{n,\varphi}$: η φαινόμενη θερμοκρασία του τμήματος εμπλουτισμού που υπολογίζεται ως η αριθμητική μέση θερμοκρασία του τμήματος εμπλουτισμού(K).
 $T_{m,\varphi}$: η φαινόμενη θερμοκρασία του τμήματος εξάντλησης που υπολογίζεται ως η αριθμητική μέση θερμοκρασία του τμήματος εξάντλησης(K).
- $S_{n,i}$: ο παράγοντας εξάντλησης του συστατικού i στο τμήμα εμπλουτισμού.
 $S_{m,i}$: ο παράγοντας εξάντλησης του συστατικού i στο τμήμα εξάντλησης.
 h_i : παράμετρος του συνόλου εξισώσεων της απλοποιημένης εξίσωσης υπολογισμού των ανακτήσεων των συστατικών στο υπόλειμμα, που αντιστοιχεί στο συστατικό i .
 $r_{i,B}$: η ανάκτηση του συστατικού i στο υπόλειμμα.
- Q_c : το φορτίο του συμπυκνωτήρα (kW).
 Q_r : το φορτίο του αναβραστήρα (kW).
- \bar{K}_i : ο φαινόμενος λόγος ισορροπίας του συστατικού i στο τμήμα εξάντλησης. Υπολογίζεται στην φαινόμενη θερμοκρασία του τμήματος εξάντλησης.
 K_i : ο φαινόμενος λόγος ισορροπίας του συστατικού i στο τμήμα εμπλουτισμού. Υπολογίζεται στην φαινόμενη θερμοκρασία του τμήματος εμπλουτισμού.
 $K_{i,M+1}$: ο λόγος ισορροπίας του συστατικού i στη βαθμίδα τροφοδοσίας (M+1). Υπολογίζεται στη θερμοκρασία της ζώνης τροφοδοσίας.
 $K_i(P, T)$: συντελεστής ισορροπίας του συστατικού i σε πίεση P (kPa) και θερμοκρασία T (K).
 $h_V(y_i, T)$: η γραμμομοριακή ενθαλπία (kJ/kmole) αέριου μίγματος με σύσταση y_i , σε θερμοκρασία T (K).
 $h_L(x_i, T)$: η γραμμομοριακή ενθαλπία (kJ/kmole) υγρού μίγματος με σύσταση x_i , σε θερμοκρασία T (K).
 E_1 : συντελεστής μετατροπής μονάδων ίσος με (1/3600) h/sec.

Στο σχήμα 6-1 φαίνονται μερικοί από τους παραπάνω συμβολισμούς για μία αποστακτική στήλη με μερικό αναβραστήρα και ολικό συμπυκνωτήρα.



Σχήμα 6-1 : Τυπική αποστακτική στήλη.

Παρατηρήσεις

1. Οι εξισώσεις (20im) δίδουν τη σύσταση της υγρής φάσης σε κάθε βαθμίδα του τμήματος εξάντλησης, εκτός από τη βαθμίδα 1. Σε αυτή τη βαθμίδα η σύσταση υπολογίζεται μέσω του πρώτου συνόλου εξισώσεων του μαθηματικού προτύπου. Συνεπώς, ο αριθμός αυτών των εξισώσεων είναι $C(M-1)$. Από τις εξισώσεις (21in) προκύπτει η σύσταση της υγρής φάσης σε κάθε βαθμίδα στο τμήμα εμπλουτισμού, εκτός από τη βαθμίδα N. Στη βαθμίδα N, ο υπολογισμός της σύστασης γίνεται μέσω των εξισώσεων ισορροπίας (22i) του πίνακα 6-2, αφού η σύσταση των ατμών σε αυτή τη βαθμίδα υπολογίζεται από το πρώτο σύνολο εξισώσεων. Επομένως, ο αριθμός των σχέσεων (21in) είναι $C[(N-1)-(M+1)]$. Οι εξισώσεις (24k) υπολογισμού της θερμοκρασίας του πίνακα 6-2 είναι N-2. Η θερμοκρασία στην βαθμίδα 1 (T_1), καθώς και η θερμοκρασία στη βαθμίδα N (T_N) υπολογίζονται από το πρώτο σύνολο εξισώσεων του μαθηματικού προτύπου.

2. Οι λόγοι ισορροπίας και οι ειδικές ενθαλπίες δεν συμπεριλαμβάνονται στις μεταβλητές του μαθηματικού προτύπου.

Οι λόγοι ισορροπίας θεωρείται ότι εξαρτώνται από την πίεση και τη θερμοκρασία, υπολογίζονται από τη συσχέτιση του McWilliams (Mc Williams, 1973). Έτσι, η εφαρμογή του μαθηματικού προτύπου που αναπτύχθηκε περιορίζεται σε μίγματα που αποτελούνται από τους παρακάτω 14 ελαφρούς υδρογονάνθρακες : Μεθάνιο, αιθυλένιο, αιθάνιο, προπυλένιο, προπάνιο, ισοβουτάνιο, κ-βουτάνιο, ισοπεντάνιο, κ-πεντάνιο, κ-εξάνιο, κ-επτάνιο, κ-οκτάνιο, κ-εννεάνιο, κ-δεκάνιο. Μόνο για τους 14 αυτούς υδρογονάνθρακες προβλέπονται οι λόγοι ισορροπίας από τη συσχέτιση του Mc Williams. Η συσχέτιση αυτή περιλαμβάνεται στο παράρτημα 3.

Η ειδική ενθαλπία μίγματος υποθέτουμε ότι εξαρτάται από τη σύσταση και τη θερμοκρασία και ο αναλυτικός τρόπος υπολογισμού της περιγράφεται στο παράρτημα 3. Οι ειδικές ενθαλπίες, όπως φαίνεται από τις εξισώσεις του προτύπου, χρησιμοποιούνται μόνο στον υπολογισμό των φορτίων του αναβραστήρα και του συμπυκνωτήρα. Στην προσέγγιση που περιγράφεται στο παράρτημα 3, θεωρείται ότι τα μίγματα υγρής και αέριας φάσης είναι ιδανικά. Τα αποτελέσματα δεν αναμένονται ακριβή, διότι οι πιέσεις λειτουργίας της στήλης δεν είναι πάντα τόσο χαμηλές ώστε οι παραδοχές ιδανικών μιγμάτων να είναι ικανοποιητικές. Δίνουν απλά μία τάξη μεγέθους για τα φορτία, καθώς και τον τρόπο μεταβολής τους.

6.4 Βαθμοί ελευθερίας της διεργασίας

Ο King (King,1980) προσδιορίζει με βάση τον περιγραφικό κανόνα τους ΒΕ της διεργασίας που περιγράφει το μαθηματικό πρότυπο της παραγράφου 6.3. Τα συμπεράσματα στα οποία καταλήγει συνοψίζονται στον πίνακα 6-4.

Πίνακας 6-4 : Βαθμοί ελευθερίας με βάση τον περιγραφικό κανόνα της διεργασίας που περιγράφεται στην παράγραφο 6.1. C είναι ο αριθμός συστατικών του μίγματος.

συμπυκνωτήρας → αναβραστήρας ↓	ολικός	μερικός
ολικός	C+8	C+7
μερικός	C+7	C+6

Ο προσδιορισμός των ΒΕ της διεργασίας μπορεί να γίνει και με καταμέτρηση του αριθμού των μεταβλητών και των εξισώσεων του μαθηματικού προτύπου που την περιγράφει. Έτσι, ο αριθμός των μεταβλητών που συμμετέχουν στις εξισώσεις του μοντέλου είναι :

$$M = (N+9)C + N + 19 \quad (6-1)$$

Ενώ ο αριθμός των εξισώσεων είναι :

$$E = (N+8)C + N + 13 \quad (6-2)$$

Συνεπώς ο αριθμός των μεταβλητών που πρέπει να καθοριστούν για να οριστεί μονοσήμαντα η διεργασία είναι :

$$BE = M - E = C + 6 \quad (6-3)$$

Παρατηρήσεις

1. Κατά την ανάλυση της διεργασίας με βάση τον περιγραφικό κανόνα βρέθηκε ότι οι βαθμοί ελευθερίας εξαρτώνται από τον τύπο του αναβραστήρα και του συμπυκνωτήρα (πίνακας 6-4). Τα συμπεράσματα με βάση τον περιγραφικό κανόνα δεν έρχονται σε αντίθεση με τα αποτελέσματα που προέκυψαν με βάση το μαθηματικό πρότυπο που αναπτύχθηκε. Η παραδοχή Δ της παραγράφου 6.2 καθορίζει εξαρχής 1 ή και 2 μεταβλητές, μειώνοντας τον αριθμό αυτών που πρέπει να καθοριστούν για τη μονοσήμαντη επίλυση του συστήματος εξισώσεων του προτύπου. Έτσι, αν ο συμπυκνωτήρας είναι ολικός και ο αναβραστήρας μερικός η παραδοχή Δ καθορίζει μία ανεξάρτητη μεταβλητή (την θερμοκρασία αναρροής). Μία είναι η ανεξάρτητη μεταβλητή που καθορίζεται από την παραδοχή Δ και στην περίπτωση μερικού συμπυκνωτήρα και ολικού αναβραστήρα (η θερμοκρασία των ατμών που φεύγουν από τον αναβραστήρα). Τέλος, αν και ο αναβραστήρας και ο συμπυκνωτήρας είναι ολικοί, η παραδοχή Δ καθορίζει και τις δύο ανεξάρτητες μεταβλητές που αναφέρθηκαν. Συνεπώς, σε κάθε περίπτωση τα αποτελέσματα του πίνακα 6-4 επιβεβαιώνονται.
2. Οι ελεύθερες μεταβλητές του μαθηματικού προτύπου είναι δυνατό να υπολογιστούν από το πρώτο σύνολο εξισώσεων του προτύπου. Το δεύτερο και τρίτο σύνολο εξισώσεων έχει τόσες μεταβλητές όσες και εξισώσεις.

6.5 Εναλλακτικά προβλήματα

Η σύνθεση του συνόλου των ελεύθερων μεταβλητών σε κάθε διεργασία προσδιορίζει την ταυτότητα του αντίστοιχου προβλήματος και κατευθύνει την επίλυση του. Η επιλογή των ελεύθερων μεταβλητών περιορίζεται μόνο από την αναγκαιότητα ανεξαρτησίας μεταξύ τους. Έτσι, ο αριθμός των προβλημάτων σχεδιασμού και προσομοίωσης λειτουργίας σε μόνιμη κατάσταση μπορεί να είναι αρκετά μεγάλος (και εξαρτάται από τους BE της διεργασίας και τον συνολικό αριθμό των μεταβλητών της).

Τα εναλλακτικά προβλήματα που αντιμετωπίζονται στην εργασία είναι προβλήματα προσομοίωσης λειτουργίας στη μόνιμη κατάσταση.

Για κάθε πρόβλημα θεωρούνται ως διδόμενες μεταβλητές οι εξής :

$$F, q, z_i, P, N, M$$

- όπου F : η γραμμομοριακή παροχή της τροφοδοσίας (kmol/h).
 q : η θερμική κατάσταση της τροφοδοσίας.
 z_i : γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στην τροφοδοσία.
 P : η πίεση λειτουργίας της αποστακτικής στήλης (atm).
 N : ο αριθμός των θεωρητικών βαθμίδων της αποστακτικής στήλης (περιλαμβάνει μερικό αναβραστήρα και μερικό συμπυκνωτήρα).

M : ο αριθμός των θεωρητικών βαθμίδων κάτω από τη βαθμίδα τροφοδοσίας (περιλαμβάνει μερικό συμπυκνωτήρα).

Ο αριθμός των μεταβλητών αυτών είναι $C+4$. Σημειώνεται ότι καθορίζονται $C-1$ γραμμομοριακά κλάσματα στην τροφοδοσία, αφού το τελευταίο είναι δυνατό να υπολογιστεί.

Έτσι, πρέπει να καθοριστούν ακόμη 2 μεταβλητές για τη μονοσήμαντη επίλυση του συστήματος εξισώσεων του μαθηματικού προτύπου. Αυτές οι δύο ανεξάρτητες μεταβλητές μπορεί να είναι δύο ανεξάρτητες παροχές ή ο λόγος αναρροής και μία παροχή (π.χ. \bar{V}, D ή V, D ή R, V ή L, B).

όπου	R	: ο (εξωτερικός) λόγος αναρροής της αποστακτικής στήλης.
	B	: η γραμμομοριακή παροχή υπολείμματος της αποστακτικής στήλης (kmoles/h).
	D	: η γραμμομοριακή παροχή αποστάγματος της αποστακτικής στήλης (kmoles/h).
	L	: η γραμμομοριακή παροχή του υγρού στο τμήμα εμπλουτισμού της αποστακτικής στήλης (kmoles/h).
	V	: η γραμμομοριακή παροχή των ατμών στο τμήμα εμπλουτισμού της αποστακτικής στήλης (kmoles/h).
	\bar{L}	: η γραμμομοριακή παροχή του υγρού στο τμήμα εξάντλησης της αποστακτικής στήλης (kmoles/h).
	\bar{V}	: η γραμμομοριακή παροχή των ατμών στο τμήμα εξάντλησης της αποστακτικής στήλης (kmoles/h).

Παρατηρήσεις

1. Στην παρούσα εργασία θεωρούμε ότι οι δύο υπολειπόμενες μεταβλητές είναι η παροχή της αναρροής (ή η γραμμομοριακή παροχή του υγρού στο τμήμα εμπλουτισμού) της αποστακτικής στήλης, L , και η γραμμομοριακή παροχή αποστάγματος, D .
2. Αντιμετωπίζονται, όπως αναφέρθηκε, προβλήματα προσομοίωσης λειτουργίας σε μόνιμη κατάσταση. Οι προδιαγραφές για αυτή την κατηγορία προβλημάτων διευκολύνουν την επίλυση των εξισώσεων του προτύπου. Ωστόσο, το μαθηματικό μοντέλο μπορεί να εφαρμοστεί και σε προβλήματα σχεδιασμού.
3. Η χωρητικότητα μιας αποστακτικής στήλης καθορίζει σε ένα πρόβλημα προσομοίωσης λειτουργίας στη μόνιμη κατάσταση (και καθορίζεται σε ένα πρόβλημα σχεδιασμού από) την παροχή τροφοδοσίας. Η ποιότητα του διαχωρισμού (συστάσεις αποστάγματος, υπολείμματος) δεν εξαρτάται από την παροχή τροφοδοσίας και συνεπώς ούτε από τη χωρητικότητα, αν οι βαθμίδες είναι θεωρητικές. Οι συστάσεις αποστάγματος και υπολείμματος επηρεάζονται από το λόγο των άλλων παροχών προς την παροχή τροφοδοσίας.

Αν μας ενδιαφέρει μόνο η ποιότητα του διαχωρισμού και όχι η πραγματική χωρητικότητα της στήλης, κάθε παροχή στην αποστακτική στήλη μπορεί να εκφραστεί σαν συνάρτηση (πολλαπλάσιο ή υποπολλαπλάσιο) της παροχής τροφοδοσίας, χωρίς η τελευταία να λάβει συγκεκριμένη τιμή. Επίσης, κάθε φορτίο ή ενθαλπία μίγματος στην αποστακτική στήλη ανάγεται στην παροχή τροφοδοσίας. Σε αυτή την περίπτωση οι βαθμοί ελευθερίας μειώνονται κατά 1.

Κατά την ανάλυση βαθμών ελευθερίας που γίνεται θεωρούμε ότι η παροχή τροφοδοσίας αποτελεί προδιαγραφή, χωρίς στην παρούσα εργασία να ασχολούμαστε με

υπολογισμούς χωρητικότητας (διαμέτρου). Θεωρούμε ότι για τα προβλήματα προσομοίωσης λειτουργίας σε μόνιμη κατάσταση η διάμετρος της αποστακτικής στήλης επιτρέπει τροφοδοσία 100 kmole/h, ενώ για τα προβλήματα σχεδιασμού, η διάμετρος καθορίζεται από παροχή τροφοδοσίας 100 kmole/h. Με αυτό τον τρόπο επιτρέπουμε την επέκταση του προτύπου ώστε να περιλάβει και όρους χωρητικότητας.

Θα πρέπει να σημειωθεί ότι η χωρητικότητα της αποστακτικής στήλης μπορεί να συνδεθεί με οποιαδήποτε παροχή. Έτσι, τη θέση της παροχής τροφοδοσίας στην παραπάνω ανάλυση θα μπορούσε να πάρει η παροχή αποστάγματος ή υπολείμματος ή η παροχή σε κάποιο σημείο στο εσωτερικό της στήλης.

6.6 Διαδικασία επίλυσης

Παρακάτω περιγράφεται η γενική διαδικασία επίλυσης για το πρόβλημα που καθορίστηκε στην προηγούμενη παράγραφο, δηλαδή το πρόβλημα με διδόμενες μεταβλητές τις :

(F, q, z_i, P, N, M) και δύο ροές ή μία ροή και το λόγο αναρροής π.χ τις L, D.

- A. Με βάση τις διδόμενες μεταβλητές και μέσω των ολικών ισοζυγίων μάζας υπολογίζουμε κάθε ροή στην αποστακτική στήλη.
- B. Υποθέτουμε κάποιες τιμές για τα γραμμομοριακά κλάσματα των συστατικών στο υπόλειμμα. Με βάση αυτά τα κλάσματα, υπολογίζουμε σε πρώτη φάση τη σύσταση του αποστάγματος και στη συνέχεια τη σύσταση των ατμών που αφήνουν την τελευταία θεωρητική βαθμίδα (κορυφή) της στήλης. Με βάση τις συστάσεις των ατμών στην κορυφή της στήλης και του υπολείμματος και με υπολογισμούς σημείου δρόσου και σημείου φουσαλίδας υπολογίζουμε τις θερμοκρασίες κορυφής και πυθμένα της αποστακτικής στήλης.
- Γ. Θεωρούμε μια τιμή για την θερμοκρασία ζώνης τροφοδοσίας, T_{FZ} .
- Δ. Υπολογίζουμε μέσω των εξισώσεων της απλοποιημένης μεθόδου τις ανακτήσεις των συστατικών και συνεπώς τη ροή κάθε συστατικού στο υπόλειμμα. Αθροίζοντας τις παροχές για όλα τα συστατικά υπολογίζεται η συνολική παροχή υπολείμματος.
- Ε. Συνήθως η υπολογιζόμενη παροχή υπολείμματος δεν είναι ίση με αυτή που προκύπτει από τα ισοζύγια μάζας και έχει ήδη υπολογιστεί στο βήμα Α (ή αποτελεί διδόμενη μεταβλητή).
Αν η υπολογιζόμενη παροχή υπολείμματος είναι σημαντικά μεγαλύτερη από την καθοριζόμενη τιμή, για να συναντήσουμε τις απαιτήσεις των προδιαγραφών, αυξάνουμε τη θερμοκρασία της ζώνης τροφοδοσίας, T_{FZ} , διατηρώντας σταθερές τις θερμοκρασίες κορυφής και πυθμένα της αποστακτικής στήλης, και επιστρέφουμε στο βήμα Δ. Αντίστοιχα, αν η υπολογιζόμενη παροχή υπολείμματος είναι σημαντικά μικρότερη συγκρινόμενη με την καθοριζόμενη, τότε μειώνουμε τη θερμοκρασία της ζώνης τροφοδοσίας, T_{FZ} , διατηρούμε σταθερές τις θερμοκρασίες κορυφής και πυθμένα και επιστρέφουμε στο βήμα Δ.
Οι υπολογιζόμενες στο βήμα Δ ανακτήσεις δεν θα πρέπει να χρησιμοποιηθούν για νέα εκτίμηση των θερμοκρασιών κορυφής και πυθμένα αν η υπολογιζόμενη παροχή υπολείμματος είναι μακριά από την καθορισμένη τιμή. Κι αυτό γιατί οι υπολογιζόμενες σε

αυτή την περίπτωση συστάσεις κορυφής και πυθμένα είναι μακριά από αυτές που υπαγορεύουν οι προδιαγραφές. Έτσι, θεωρείται σωστότερο, να μην γίνονται νέες εκτιμήσεις για τις θερμοκρασίες κορυφής και πυθμένα, μέχρι η υπολογιζόμενη παροχή υπολείμματος πλησιάσει την καθοριζόμενη.

Όταν η υπολογιζόμενη παροχή υπολείμματος προσεγγίσει την καθοριζόμενη, επιστρέφουμε στο βήμα Β και χρησιμοποιούμε τις υπολογιζόμενες ανακτήσεις για την εκτίμηση νέων θερμοκρασιών κορυφής και πυθμένα. Η επαναληπτική αυτή διαδικασία σταματά όταν σε δύο διαδοχικές επαναλήψεις υπολογίσουμε ίσες ανακτήσεις για κάθε συστατικό στο υπόλειμμα.

ΣΤ. Υπολογίζουμε τη θερμοκρασία σε κάθε βαθμίδα της αποστακτικής στήλης (δεύτερο σύνολο εξισώσεων του μαθηματικού προτύπου).

Ζ. Τέλος, υπολογίζουμε το φορτίο του αναβραστήρα και του συμπυκνωτήρα της αποστακτικής στήλης (τρίτο σύνολο εξισώσεων του μαθηματικού προτύπου).

Παρατηρήσεις

1. Η θερμοκρασία της ζώνης τροφοδοσίας, T_{FZ} , μεταβάλλεται ανεξάρτητα ώστε να “οδηγήσει” τη στήλη προς στην καθορισμένη τιμή για την παροχή υπολείμματος. Αυτή η επαναληπτική διαδικασία είναι ανάλογη με αυτή ενός χειριστή που μεταβάλλει τη θερμοκρασία του δίσκου με βάση τον οποίο γίνεται η ρύθμιση, μέχρι η στήλη να δώσει τα επιθυμητά προϊόντα.

Έστω ότι η υπολογιζόμενη στο βήμα Δ τιμή για την παροχή υπολείμματος είναι μεγαλύτερη από αυτή που καθορίζεται στο βήμα Α (ή ως προδιαγραφή). Τότε ο χειριστής διαπιστώνει ότι

α) το υπόλειμμα περιέχει μεγαλύτερη από την επιθυμητή ποσότητα ελαφρών συστατικών,

β) η κατανομή θερμοκρασίας στην αποστακτική στήλη εμφανίζει χαμηλότερες από τις επιθυμητές τιμές

και αυξάνει τη θερμοκρασία του δίσκου ρύθμισης, μέσω αύξησης της προσφερόμενης από τον αναβραστήρα θερμότητας.

2. Πέρα από τη γενική παρουσίαση διαδικασίας επίλυσης των προβλημάτων που περιγράφηκε παραπάνω, στο παράρτημα 4 υπάρχει ο αναλυτικός αλγόριθμος επίλυσης με αναφορά στην αρίθμηση των εξισώσεων και στις αντίστοιχες μεταβλητές επίλυσης.

3. Οι μέθοδοι σύγκλισης που χρησιμοποιούνται για την υλοποίηση των επαναληπτικών διαδικασιών του αλγορίθμου περιέχονται στο παράρτημα 5. Για τον υπολογισμό των θερμοκρασιών σημείου φυσαλίδας και δρόσου χρησιμοποιείται η μέθοδος Newton-Raphson. Για τη σύγκλιση που αφορά την θερμοκρασία ζώνης τροφοδοσίας, T_{FZ} , χρησιμοποιείται η μέθοδος False-position.

Τα αποτελέσματα των υπολογισμών

Στο παρόν κεφάλαιο, επιχειρείται εκτίμηση της ακρίβειας των αποτελεσμάτων του προγράμματος που αναπτύχθηκε με βάση το πρότυπο του κεφαλαίου 6. Αφού παρουσιαστεί το μέτρο σύγκρισης των αποτελεσμάτων και αναφερθούν πιθανές αιτίες αστοχίας, παρουσιάζονται με πίνακες και σχήματα τα αποτελέσματα (συστάσεις προϊόντων και κατανομή θερμοκρασίας στο εσωτερικό της στήλης) και οι αποκλίσεις τους για ένα από τα παραδείγματα που εξετάστηκαν. Επίσης, παρουσιάζεται ένας συγκεντρωτικός πίνακας με τις μέσες και μέγιστες αποκλίσεις στα αποτελέσματα για όλα τα παραδείγματα που μελετήθηκαν. Στο τέλος του κεφαλαίου, μελετάται η ευαισθησία των αποτελεσμάτων σε πιθανές αστοχίες στην εκτίμηση των τιμών των λόγων ισορροπίας.

7.1 Το πρόγραμμα

Ο αλγόριθμος επίλυσης του μαθηματικού προτύπου υλοποιείται στο πρόγραμμα EXCEL 5.0. Ο κώδικας είναι γραμμένος στη γλώσσα VISUAL BASIC του EXCEL 5.0 και περιλαμβάνεται στο παράρτημα 7.

Το πρόγραμμα αντιμετωπίζει προβλήματα προσομοίωσης λειτουργίας στη μόνιμη κατάσταση της διεργασίας απόσταξης που περιγράφεται στην παράγραφο 6.1 και προσεγγίζεται με βάση τις παραδοχές της παραγράφου 6.2.

7.2 Η ακρίβεια των αποτελεσμάτων του προγράμματος

Η αποτίμηση της ακρίβειας των αποτελεσμάτων του προτύπου, δηλαδή η απόκλιση τους από την πραγματικότητα, απαιτεί τη σύγκρισή τους με πειραματικά δεδομένα. Όμως, πειραματικά δεδομένα δεν διατίθενται. Έτσι, γίνεται μια προσπάθεια να εκτιμηθεί η απόκλιση των αποτελεσμάτων που προκύπτουν από την εφαρμογή του προτύπου που αναπτύσσεται στην παρούσα εργασία από αυτά μιας αναλυτικής μεθόδου. Γίνεται, δηλαδή μια απόπειρα αξιολόγησης των εξαγομένων του απλοποιημένου προτύπου σε σχέση όχι με το πείραμα, αλλά με μια ακριβέστερη και σίγουρα περισσότερο λεπτομερειακή περιγραφή του πειράματος.

Προκειμένου να γίνει μια ολοκληρωμένη μελέτη απόκλισης των αποτελεσμάτων, χρειάζεται μεγάλος αριθμός δοκιμών και συγκρίσεων για πλήθος μιγμάτων και για διαφορετικές συνθήκες λειτουργίας. Με αυτό τον τρόπο, είναι δυνατό να προκύψει ένα ασφαλές συμπέρασμα για το μέγεθος της απόκλισης, καθώς και να προσδιοριστούν τα μίγματα ή οι συνθήκες λειτουργίας για τις οποίες η προσέγγιση αποτελεσμάτων είναι περισσότερο επιτυχής.

Με την εξέταση ενός περιορισμένου αριθμού περιπτώσεων-παραδειγμάτων, κάποιος είναι σε θέση να παρουσιάσει μόνο ενδεικτικά μια εκτίμηση της αξιοπιστίας των αποτελεσμάτων άρα και του αντίστοιχου προτύπου. Αυτός είναι και ο στόχος της διερεύνησης που ακολουθείται παρακάτω. Συγκρίνονται τα αποτελέσματα του απλοποιημένου προτύπου και της αναλυτικής μεθόδου για 8 διαφορετικά παραδείγματα, που καλύπτουν μια ποικιλία μιγμάτων και ένα σχετικά εκτεταμένο εύρος συνθηκών λειτουργίας.

Η αναλυτική μέθοδος που χρησιμοποιείται για την εκτίμηση της απόκλισης των εξαγομένων από το απλοποιημένο πρότυπο δεν περιλαμβάνει τις παραδοχές σταθερών γραμμομοριακών ροών και σταθερών σχετικών πτητικοτήτων σε κάθε τμήμα της στήλης. Ωστόσο, και στην αναλυτική μέθοδο η πίεση λειτουργίας θεωρείται σταθερή, ενώ οι βαθμίδες της στήλης θεωρητικές. Το πρότυπο που χρησιμοποιείται για την περιγραφή της ισορροπίας και την εκτίμηση των θερμοδυναμικών ιδιοτήτων (ενθαλπών) είναι το PSRK (Predictive-Soave-Redlich-Kwong equation of state model), το οποίο αποτελεί μια επέκταση της καταστατικής εξίσωσης SRK. Το μοντέλο είναι δυνατό να χρησιμοποιηθεί για μίγματα μη πολικών και πολικών συστατικών που ενδέχεται να περιέχουν και ελαφρά αέρια, ακόμη και υψηλές πιέσεις και θερμοκρασίες. Τα αποτελέσματα αναμένονται λιγότερο ακριβή σε συνθήκες κοντά στο κρίσιμο σημείο. Οι υπολογισμοί της αναλυτικής μεθόδου διεξάγονται με το εμπορικό πακέτο υπολογισμών ASPEN PLUS.

Οι πιθανές αστοχίες του απλοποιημένου προτύπου σε σχέση με το αναλυτικό οφείλονται :

- α) στην παραβίαση της παραδοχής σταθερών γραμμομοριακών ροών στο τμήμα εξάντλησης και στο τμήμα εμπλουτισμού της αποστακτικής στήλης. Ο διαχωρισμός εξαρτάται κυρίως από το λόγο της γραμμομοριακής ροής του υγρού προς αυτή των ατμών. Έτσι, η σημαντική μεταβολή αυτού του λόγου σε κάθε τμήμα της αποστακτικής στήλης, αποτελεί ένα σημαντικό παράγοντα αστοχίας του προτύπου.
- β) στην παραβίαση της παραδοχής σταθερών σχετικών πτητικοτήτων στο τμήμα εξάντλησης και στο τμήμα εμπλουτισμού της αποστακτικής στήλης.
- γ) στην περιορισμένη ακρίβεια υπολογισμού των λόγων ισορροπίας σε κάθε τμήμα της στήλης.

7.3 Σύγκριση αποτελεσμάτων απλοποιημένου-αναλυτικού προτύπου

Τα αποτελέσματα που συγκρίνονται είναι τα γραμμομοριακά κλάσματα στο υπόλειμμα και στο απόσταγμα, καθώς και οι θερμοκρασίες σε κάθε βαθμίδα της αποστακτικής στήλης. Ο υπολογισμός αυτών των μεγεθών είναι και ο στόχος της ανάπτυξης του προτύπου και του αντίστοιχου προγράμματος.

Πριν την παρουσίαση των αποτελεσμάτων και των αποκλίσεων τους κρίνεται σκόπιμο να διευκρινιστεί η έννοια της απόκλισης. Ως απόκλιση αποτελεσμάτων ορίζεται η απόκλιση αυτών της απλοποιημένης από αυτά της αναλυτικής μεθόδου. Έτσι, στους πίνακες αποτελεσμάτων που ακολουθούν ορίζονται οι αποκλίσεις :

$$1000 \Delta x_{i,B} = 1000 [x_{i,B}(αν) - x_{i,B}(απ)] \quad (7-1)$$

$$1000 \Delta x_{i,D} = 1000 [x_{i,D}(αν) - x_{i,D}(απ)] \quad (7-2)$$

και

$$\% | \Delta T_j | = \left| \frac{T_j(αν) - T_j(απ)}{T_j(αν)} \right| 100\% \quad (7-3)$$

όπου $x_{i,B}$: το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στο υπόλειμμα
 $x_{i,D}$: το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στο απόσταγμα.
 T_j : η θερμοκρασία στην βαθμίδα j (K).
αν. : αναλυτικής μεθόδου
απ. : απλοποιημένης μεθόδου

Ως μέση απόλυτη απόκλιση (ΜΕΣ.Α) ορίζουμε το μέσο όρο των απόλυτων τιμών των αντίστοιχων αποκλίσεων. Ως μέγιστη απόλυτη απόκλιση (ΜΕΓ.Α), ορίζεται η μέγιστη τιμή των απόλυτων τιμών των αποκλίσεων.

Για την εκτίμηση των διαφορών των αποτελεσμάτων στη σύσταση υπολείμματος και αποστάγματος χρησιμοποιείται η απόκλιση

$$1000 \Delta x_i = 1000 [x_i(\text{αναλυτικής}) - x_i(\text{απλοποιημένης})] \quad (7-4)$$

και όχι η % απόκλιση για δύο λόγους :

α) Η % απόκλιση της τιμής ενός γραμμομοριακού κλάσματος x_i μπορεί να οριστεί με δύο τρόπους :

$$\% \Delta x_i = \frac{x_i(\alpha \nu) - x_i(\alpha \pi)}{x_i(\alpha \nu)} 100\% \quad (7-5)$$

$$\text{ή } \% \Delta x_i = \frac{[1 - x_i(\alpha \nu)] - [1 - x_i(\alpha \pi)]}{1 - x_i(\alpha \nu)} 100\% \quad (7-6)$$

όπου $\alpha \nu$: αναλυτικής μεθόδου
 $\alpha \pi$: απλοποιημένης μεθόδου

Είναι προφανές ότι το αποτέλεσμα που προκύπτει από τη σχέση (7-5) δεν είναι ίδιο με αυτό της εξίσωσης (7-6), ενώ και τα δύο είναι ορθώς ορισμένα.

β) Όταν συγκρίνονται γραμμομοριακά κλάσματα της τάξης του 10^{-4} ή ακόμη μικρότερης τάξης, η % απόκλιση μπορεί να είναι και 150%, ενώ η μέθοδος να έχει προβλέψει με πολύ μεγάλη ακρίβεια τα γραμμομοριακά κλάσματα των υπολοίπων συστατικών.

Υπάρχει βέβαια και η περίπτωση που στη σύσταση ενός προϊόντος γραμμομοριακό κλάσμα της τάξης του 10^{-3} για κάποιο συστατικό είναι εξαιρετικά σημαντικό. Αν όμως μας ενδιαφέρει τα αποτελέσματα να είναι τόσο ακριβή, δεν θα χρησιμοποιήσουμε μια απλοποιημένη μέθοδο για την τελική απόφαση.

Η διαφορά $1000 \Delta x_i$ λαμβάνει υπόψη τη βαρύτητα του συστατικού i στη σύσταση του αντίστοιχου προϊόντος. Έτσι, η απόκλιση του γραμμομοριακού κλάσματος ενός συστατικού με υψηλή περιεκτικότητα στο αντίστοιχο προϊόν, είναι σημαντικότερη από την απόκλιση του γραμμομοριακού κλάσματος ενός συστατικού με μικρότερη περιεκτικότητα στο ίδιο προϊόν.

Παρακάτω αντιπαραβάλλονται τα αποτελέσματα απλοποιημένου-αναλυτικού προτύπου για το παράδειγμα 1. Τα αποτελέσματα για κάθε παράδειγμα περιέχονται στο παράρτημα 6.

Παράδειγμα 1 : Ζητούνται τα γραμμομοριακά κλάσματα στο απόσταγμα και στο υπόλειμμα και η κατανομή θερμοκρασίας εντός αποστακτικής στήλης που διαχωρίζει μίγμα τροφοδοσίας με γραμμομοριακή παροχή $F=100$ kmol/h και σύσταση :

Πίνακας 7.1 : Γραμμομοριακά κλάσματα των συστατικών του μίγματος τροφοδοσίας του παραδείγματος 1.

Συστατικά	z_i
Ισοβουτάνιο	0,0042
κ-Βουτάνιο	0,2238
Ισοπεντάνιο	0,3997
κ-Πεντάνιο	0,3615
κ-Εξάνιο	0,0106
κ-Επτάνιο	0,0002

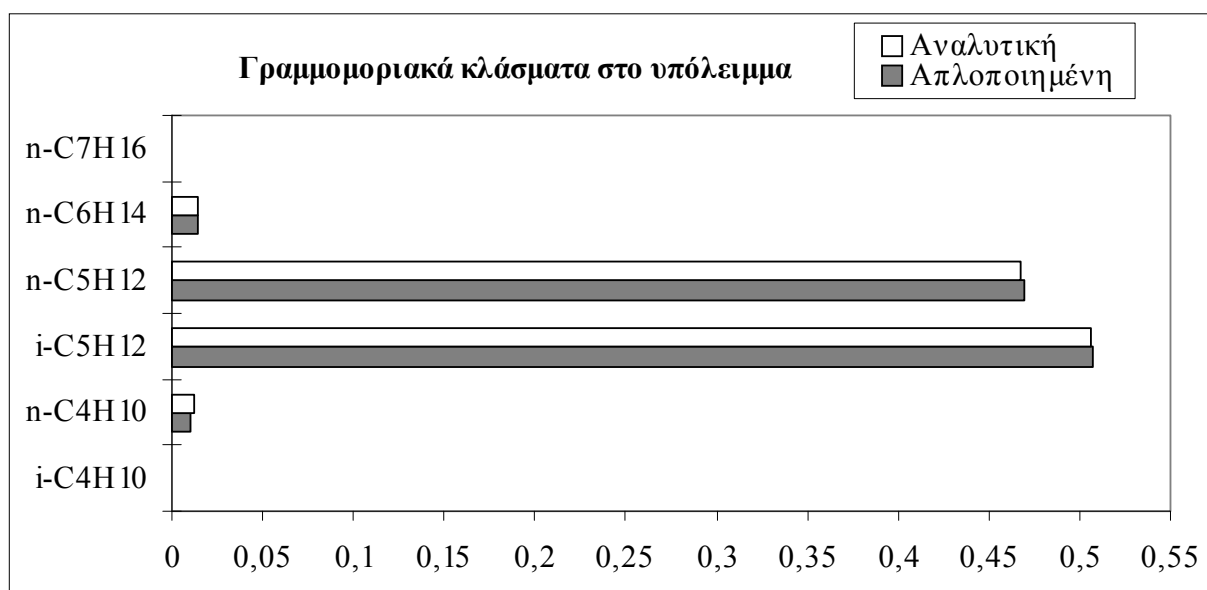
Η τροφοδοσία είναι κορεσμένο υγρό, δηλαδή $q = 1$. Η πίεση λειτουργίας της στήλης είναι 7,8 atm και ο αριθμός των θεωρητικών βαθμίδων της 18. Οι βαθμίδες κάτω από τη βαθμίδα τροφοδοσίας είναι 12. Η γραμμομοριακή παροχή του αποστάγματος είναι 23,8

kmol/h και η παροχή της αναρροής είναι 158,6 kmol/h. Ο αναβραστήρας της αποστακτικής στήλης είναι μερικός και ο συμπυκνωτήρας ολικός.

Τα γραμμομοριακά κλάσματα αποστάγματος και υπολείμματος, όπως αυτά προκύπτουν από τα δύο πρότυπα, και οι αντίστοιχες αποκλίσεις φαίνονται στον πίνακα 7.2 . Στο σχήμα 7-1 παρίστανται γραφικά με ραβδόγραμμα τα αποτελέσματα για το υπόλειμμα.

Πίνακας 7-2 : Γραμμομοριακά κλάσματα υπολείμματος και αποστάγματος με βάση την απλοποιημένη και την αναλυτική μέθοδο και η μεταξύ τους απόκλιση για το παράδειγμα 1.

Συστατικά	$x_{i,B}$ (αν)	$x_{i,B}$ (απ)	$1000\Delta x_{i,B}$	$x_{i,D}$ (αν)	$x_{i,D}$ (απ)	$1000\Delta x_{i,D}$
Ισοβουτάνιο	0,0000	0,0000	0,0	0,0176	0.0176	-0.1
κ-Βουτάνιο	0,0127	0,0098	2,9	0,8996	0.9089	-9.3
Ισοπεντάνιο	0,5061	0,5068	-0,8	0,0592	0.0566	2.5
κ-Πεντάνιο	0,4670	0,4692	-2,1	0,0236	0.0168	6.8
κ-Εξάνιο	0,0139	0,0139	0,0	0,0000	0.0000	0.0
κ-Επτάνιο	0,0003	0,0003	0,0	0,0000	0.0000	0.0
		ΜΕΣ.Α	1,0		ΜΕΣ.Α	3,1
		ΜΕΓ.Α	2,9		ΜΕΓ.Α	9,3



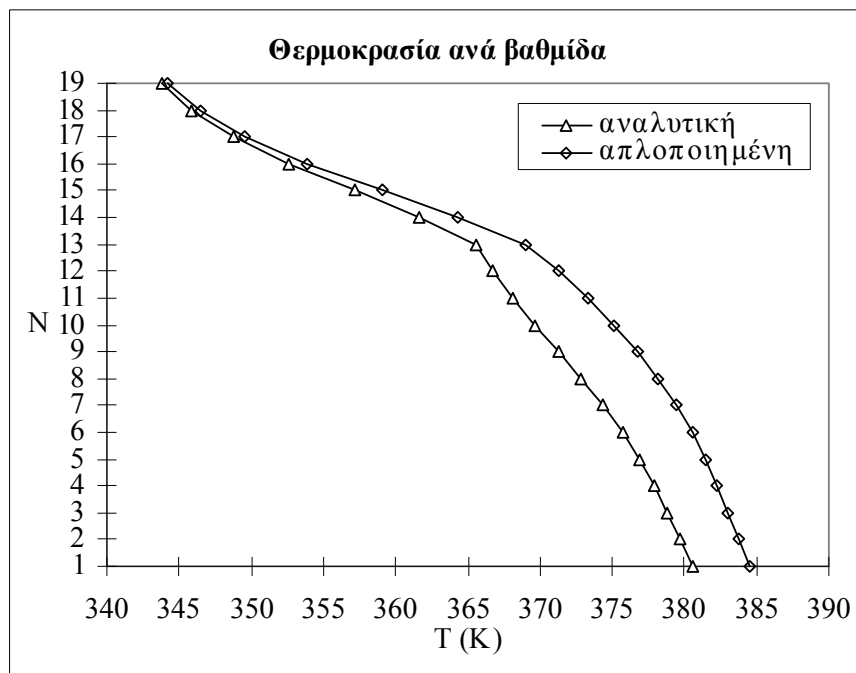
Σχήμα 7-1 : Γραμμομοριακά κλάσματα στο υπόλειμμα με βάση την αναλυτική και την απλοποιημένη μέθοδο για το παράδειγμα 1.

Η κατανομή θερμοκρασίας εντός της αποστακτικής στήλης για κάθε μία από τις δύο προσεγγίσεις και η μεταξύ τους απόκλιση περιγράφεται στον πίνακα 7-3 και απεικονίζεται στο σχήμα 7-2.

Πίνακας 7-3 : Θερμοκρασία σε κάθε βαθμίδα της αποστακτικής στήλης με βάση την απλοποιημένη και την αναλυτική μέθοδο και η μεταξύ τους απόκλιση για το παράδειγμα 1.

N	T_i (αν)(K)	T_i (απ)(K)	$\% \Delta T_i $
1	380,6	384,5	1,0

2	379,7	383,7	1,1
3	378,9	383,0	1,1
4	377,9	382,3	1,1
5	376,9	381,5	1,2
6	375,7	380,5	1,3
7	374,3	379,4	1,4
8	372,9	378,2	1,4
9	371,3	376,8	1,5
10	369,7	375,1	1,5
11	368,2	373,3	1,4
12	366,8	371,3	1,2
13	365,6	369,1	1,0
14	361,6	364,3	0,8
15	357,1	359,0	0,5
16	352,6	353,9	0,4
17	348,8	349,6	0,2
18	345,8	346,4	0,2
19	343,8	344,2	0,1
	ΜΕΣ.Α		1,0
	ΜΕΓ.Α		1,5



Σχήμα 7-2 : Κατανομή θερμοκρασίας εντός της αποστακτικής στήλης με βάση την απλοποιημένη και την αναλυτική μέθοδο για το παράδειγμα 1.

Τα αποτελέσματα και οι αντίστοιχες αποκλίσεις για κάθε παράδειγμα που εξετάστηκε παρουσιάζονται στο παράρτημα 6. Οι μέσες και οι μέγιστες αποκλίσεις για κάθε παράδειγμα παρουσιάζονται στον πίνακα 7-4 :

Πίνακας 7-4 : Συγκεντρωτικός πίνακας σύγκρισης αποτελεσμάτων απλοποιημένου και αναλυτικού προτύπου για κάθε παράδειγμα που εξετάστηκε.

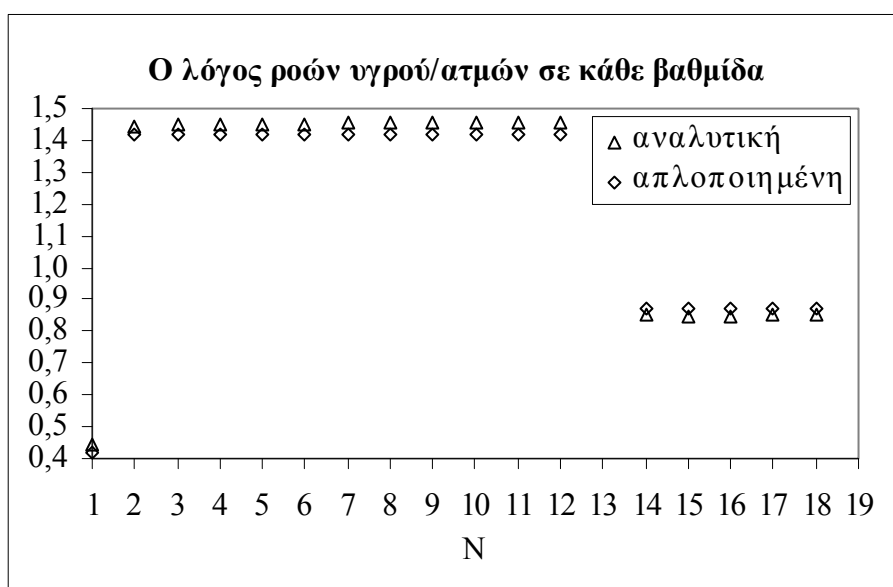
Παράδειγμα	$1000\Delta x_{i,B}$	$1000\Delta x_{i,B}$	$1000\Delta x_{i,D}$	$1000\Delta x_{i,D}$	$\% \Delta T_j$	$\% \Delta T_j$
	ΜΕΣ.Α	ΜΕΓ.Α	ΜΕΣ.Α	ΜΕΓ.Α	ΜΕΣ.Α	ΜΕΓ.Α
1	1,0	2,9	3,1	9,3	1,0	1,5
2	5,1	17,6	10,9	38,0	3,2	5,5
3	22,3	33,4	22,3	33,4	1,0	2,4
4	9,3	18,6	13,9	27,8	1,6	2,3
5	9,7	25,9	8,2	22,0	1,4	2,3
6	6,2	9,6	19,7	30,4	0,8	1,2
7	5,8	11,7	3,9	7,8	0,5	1,3
8	0,2	0,4	0,2	0,4	0,1	0,5
ΟΜΕΣ.Α	7,5	15,0	10,3	21,1	1,2	2,1

όπου ΟΜΕΣ.Α : ολική μέση απόκλιση, δηλαδή η μέση απόκλιση των μέσων (ΜΕΣ.Α) ή των μέγιστων αποκλίσεων (ΜΕΓ.Α).

Παρατηρήσεις

1. Οι μέσες αποκλίσεις που παρατηρούνται στο παράδειγμα 1 είναι μικρές. Το ίδιο ισχύει και για τις μέγιστες. Αυτό οφείλεται στο ότι δεν υφίστανται ουσιαστικά αιτίες αστοχίας, ή τουλάχιστο η παραβίαση των παραδοχών είναι τέτοια που δεν επιτρέπει μεγαλύτερες αποκλίσεις.

Ο λόγος των γραμμομοριακών ροών στο τμήμα εξάντλησης και στο τμήμα εμπλουτισμού δεν μεταβάλλεται σημαντικά όπως φαίνεται στο σχήμα 7-3.



Σχήμα 7-3 : Μεταβολή του λόγου γραμμομοριακής ροής υγρού προς γραμμομοριακή ροή ατμών εντός της στήλης για το παράδειγμα 1.

Επίσης, το εύρος μεταβολής της θερμοκρασίας είναι σχετικά μικρό (40K), με συνέπεια τη σχετικά μικρή μεταβολή των λόγων ισορροπίας για κάθε συστατικό, όπως φαίνεται στον πίνακα 7-5.

Πίνακας 7-5 : Μεταβολή των λόγων ισορροπίας με τη θερμοκρασία σε κάθε βαθμίδα για το παράδειγμα 1, όπως αυτή προβλέπεται από τη συσχέτιση McWilliams.

Συστατικό→ βαθμίδα ↓	Ισοβουτάνιο	κ-Βουτάνιο	Ισοπεντάνιο	κ-Πεντάνιο	κ-Εξάνιο	κ-Επτάνιο
1	2,496	2,011	1,069	0,921	0,467	0,235
2	2,469	1,988	1,055	0,908	0,459	0,230
3	2,447	1,968	1,042	0,897	0,453	0,227
4	2,424	1,947	1,030	0,886	0,446	0,223
5	2,399	1,925	1,016	0,874	0,439	0,219
6	2,370	1,900	1,001	0,861	0,431	0,215
7	2,336	1,870	0,983	0,845	0,422	0,209
8	2,298	1,837	0,962	0,827	0,412	0,204
9	2,254	1,798	0,939	0,806	0,400	0,197
10	2,204	1,755	0,913	0,783	0,386	0,189
11	2,149	1,707	0,884	0,758	0,372	0,181
12	2,089	1,655	0,853	0,730	0,356	0,173
13	2,025	1,599	0,820	0,701	0,340	0,164
14	1,890	1,482	0,751	0,640	0,306	0,145
15	1,744	1,357	0,678	0,576	0,270	0,126
16	1,608	1,241	0,611	0,518	0,239	0,110
17	1,496	1,147	0,558	0,472	0,214	0,097
18	1,418	1,081	0,521	0,440	0,197	0,088
19	1,363	1,035	0,496	0,418	0,186	0,083

2. Τα συγκεντρωτικά αποτελέσματα του πίνακα 7-4 αποτελούν μία ένδειξη για την αξιοπιστία του προτύπου. Τα αποτελέσματά του δεν είναι εξωπραγματικά. Κρίνονται επαρκή, δεν αλλοιώνουν την πραγματική εικόνα του διαχωρισμού. Το πρότυπο μπορεί να χρησιμοποιηθεί για προκαταρκτικές εκτιμήσεις.
3. Σε ορισμένα από τα παραδείγματα που εξετάστηκαν, οι αποκλίσεις των γραμμομοριακών κλασμάτων στο εσωτερικό της στήλης ήταν ικανοποιητικές : η ΜΕΣ.Α για τις αποκλίσεις $1000\Delta x_{i,j}$ ήταν κάτω από 13. Σε αυτές τις περιπτώσεις μπορούμε να έχουμε μια ικανοποιητική εικόνα των κατανομών των γραμμομοριακών κλασμάτων για κάθε συστατικό εντός της στήλης, όπως αυτές προκύπτουν από την απλοποιημένη μέθοδο.

7.4 Ανάλυση ευαισθησίας των αποτελεσμάτων

Η ανάλυση ευαισθησίας που επιχειρείται στο παρακάτω κείμενο αφορά μόνο στην εκτίμηση των λόγων ισορροπίας των συστατικών του μίγματος.

Η επίδραση της ακρίβειας υπολογισμού των λόγων ισορροπίας στα αποτελέσματα του απλοποιημένου προτύπου που αναπτύσσεται στην παρούσα εργασία, είναι δυνατό να εκτιμηθεί θεωρώντας ότι η τιμή των λόγων ισορροπίας κάθε συστατικού “υποεκτιμάται” ή “υπερεκτιμάται” σε σχέση με την τιμή που προκύπτει από τη συσχέτιση McWilliams. Βέβαια,

σε αυτή την περίπτωση οι υποτιθέμενες αστοχίες στις τιμές των λόγων ισορροπίας κάθε συστατικού δεν είναι τυχαίες, αλλά ανάλογες. Σε μια πληρέστερη ανάλυση ευαισθησίας θα έπρεπε να χρησιμοποιηθούν περισσότερες από μία μεθόδους υπολογισμού των λόγων ισορροπίας.

Στους πίνακες 7-6, 7-7, 7-8 που ακολουθούν, φαίνεται η μεταβολή της σύστασης του υπολείμματος και του αποστάγματος και της θερμοκρασίας σε κάθε βαθμίδα όταν οι τιμές των λόγων ισορροπίας, όπως αυτές υπολογίζονται από την εξίσωση McWilliams, είναι κατά 5% και 10% μικρότεροι και μεγαλύτεροι. Οι πίνακες αναφέρονται στα αποτελέσματα του παραδείγματος 1.

Πίνακας 7-6 : Μεταβολή της σύστασης του υπολείμματος σε σχέση με την %απόκλιση των λόγων ισορροπίας από τους υπολογιζόμενους με την εξίσωση McWilliams. Τα αποτελέσματα αναφέρονται στο παράδειγμα 1.

Μεταβολή των $K_i \rightarrow$ Συστατικά ↓	-10%	-5%	0%	5%	10%
Ισοβουτάνιο	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
κ-Βουτάνιο	0,0113	0,0105	0,0098	0,0092	0,0086
Ισοπεντάνιο	0,5058	0,5063	0,5068	0,5073	0,5077
κ-Πεντάνιο	0,4687	0,4689	0,4692	0,4694	0,4695
κ-Εξάνιο	0,0139	0,0139	0,0139	0,0139	0,0139
κ-Επτάνιο	0,0003	0,0003	0,0003	0,0003	0,0003

Πίνακας 7-7 : Μεταβολή της σύστασης του αποστάγματος σε σχέση με την %απόκλιση των λόγων ισορροπίας από τους υπολογιζόμενους με την εξίσωση McWilliams. Τα αποτελέσματα αναφέρονται στο παράδειγμα 1.

Μεταβολή των $K_i \rightarrow$ Συστατικά ↓	-10%	-5%	0%	5%	10%
Ισοβουτάνιο	0,0176	0,0176	0,0176	0,0176	0,0176
κ-Βουτάνιο	0,9041	0,9066	0,9089	0,9110	0,9129
Ισοπεντάνιο	0,0600	0,0583	0,0566	0,0552	0,0539
κ-Πεντάνιο	0,0183	0,0175	0,0168	0,0162	0,0156
κ-Εξάνιο	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
κ-Επτάνιο	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000

Πίνακας 7-8 : Μεταβολή της θερμοκρασίας (K) σε κάθε βαθμίδα σε σχέση με την %απόκλιση των λόγων ισορροπίας από τους υπολογιζόμενους με την εξίσωση McWilliams. Τα αποτελέσματα αναφέρονται στο παράδειγμα 1.

Μεταβολή των $K_i \rightarrow$ Βαθμίδα ↓	-10%	-5%	0%	5%	10%
1	391,1	387,7	384,5	381,6	378,9
2	390,2	386,8	383,7	380,8	378,1
3	389,4	386,1	383,0	380,1	377,5

4	388,6	385,3	382,3	379,4	376,8
5	387,7	384,5	381,5	378,7	376,0
6	386,7	383,5	380,5	377,7	375,2
7	385,6	382,4	379,4	376,7	374,1
8	384,3	381,1	378,2	375,5	372,9
9	382,8	379,7	376,8	374,0	371,5
10	381,2	378,0	375,1	372,4	369,9
11	379,4	376,2	373,3	370,6	368,0
12	377,4	374,2	371,3	368,5	366,0
13	375,2	372,0	369,1	366,3	363,8
14	370,5	367,3	364,3	361,6	359,0
15	365,2	362,0	359,0	356,3	353,8
16	360,0	356,8	353,9	351,2	348,7
17	355,5	352,4	349,6	346,9	344,4
18	352,3	349,2	346,4	343,8	341,4
19	349,9	346,9	344,2	341,6	339,3

Τα αποτελέσματα από την ανάλυση ευαισθησίας για κάθε παράδειγμα περιλαμβάνονται στο παράρτημα 6.

Παρατηρήσεις

1. Τα αποτελέσματα της ανάλυσης ευαισθησίας στα εξαγόμενα του παραδείγματος 1 είναι ενδεικτικά αυτών που προκύπτουν από την ανάλυση για κάθε ένα παράδειγμα. Οι πίνακες 7-6, 7-7, 7-8 δείχνουν ότι η σύσταση υπολείμματος και αποστάγματος καθώς και η κατανομή θερμοκρασίας δεν μεταβάλλονται σημαντικά.

Οι λόγοι ισορροπίας συμμετέχουν σε δύο σημεία στην πορεία υπολογισμού των ανακτήσεων των συστατικών στο υπόλειμμα :

α) Επηρεάζουν τον υπολογισμό της θερμοκρασίας σημείου φουσαλίδας του υπολείμματος, T_1 , και της θερμοκρασίας σημείου δρόσου των ατμών της τελευταίας θεωρητικής βαθμίδας της αποστακτικής στήλης, T_N . Συνεπώς, επηρεάζουν την εκτίμηση της φαινόμενης θερμοκρασίας (εξισώσεις 5-48 και 5-49) σε κάθε τμήμα της στήλης.

β) Επενεργούν στον υπολογισμό των παραγόντων εξάντλησης του τμήματος εμπλουτισμού, $S_{m,i}$, και του τμήματος εξάντλησης $S_{n,i}$ (εξισώσεις 5-22 και 5-40). Τον υπολογισμό αυτών των παραγόντων επηρεάζει και η φαινόμενη θερμοκρασία του κάθε τμήματος (εφόσον σε αυτή τη θερμοκρασία υπολογίζεται ο αντίστοιχος παράγοντας).

Οι παραπάνω αστοχίες εκτίμησης της φαινόμενης θερμοκρασίας και των παραγόντων εξάντλησης αλληλοεπιδρούν στη σχέση υπολογισμού των ανακτήσεων (εξίσωση 5-46). Το συμπέρασμα που εξάγεται, με βάση την ανάλυση ευαισθησίας που έγινε, είναι ότι οι επιδράσεις των αστοχιών στη σύσταση υπολείμματος και αποστάγματος είναι αλληλοαναιρούμενες. (Σε αυτό ίσως να συμβάλλει και το ότι οι μεταβολές των λόγων ισορροπίας δεν είναι τυχαίες, αλλά ανάλογες). Για αυτό και τα αποτελέσματα που αφορούν τις συστάσεις δεν μεταβάλλονται σημαντικά.

Οι αστοχίες εκτίμησης της φαινόμενης θερμοκρασίας και των παραγόντων εξάντλησης σε κάθε τμήμα της αποστακτικής στήλης αλληλοεπιδρούν και στις σχέσεις (5-23), (5-41), (5-43) υπολογισμού της σύστασης στο εσωτερικό της στήλης. Από την

αστοχία προσδιορισμού της σύστασης σε κάθε βαθμίδα επηρεάζεται και ο υπολογισμός της θερμοκρασίας σε κάθε βαθμίδα. Σε αυτό τον υπολογισμού σημείου φυσαλίδας επενεργούν και άμεσα οι αστοχίες εκτίμησης των λόγων ισορροπίας. Το καθαρό αποτέλεσμα των επιδράσεων αυτών επί της κατανομής της θερμοκρασίας στο εσωτερικό της στήλης φαίνεται ότι δεν είναι σημαντικό.

8

Παρουσίαση του προγράμματος

Στον παρόν κεφάλαιο παρουσιάζεται το περιβάλλον επικοινωνίας χρήστη-προγράμματος.

8.1 Δυνατότητες του προγράμματος

Το πρόγραμμα προσομοιώνει τη λειτουργία υπάρχουσας αποστακτικής στήλης με μια τροφοδοσία και δύο προϊόντα σε μόνιμη κατάσταση. Ο χρήστης έχει τη δυνατότητα να καθορίσει το συνολικό αριθμό βαθμίδων, τη βαθμίδα τροφοδοσίας, τη σύσταση τροφοδοσίας (πολυσυστατικό μίγμα), τη θερμική κατάσταση της τροφοδοσίας (q), την πίεση λειτουργίας, την παροχή αποστάγματος και την παροχή της αναρροής. Έχει επίσης τη δυνατότητα να επιλέξει τον τύπο του συμπυκνωτήρα κορυφής και του αναβραστήρα (ολικοί ή μερικοί).

Το πρόγραμμα υπολογίζει τη σύσταση του προϊόντος κορυφής, τη σύσταση του προϊόντος πυθμένα, το θερμικό φορτίο του συμπυκνωτήρα κορυφής, το θερμικό φορτίο του αναβραστήρα, καθώς και τις εσωτερικές ροές υγρού και ατμού στο τμήμα εμπλουτισμού και στο τμήμα εξάντλησης της αποστακτικής στήλης.

Το πρόγραμμα μπορεί επίσης να υπολογίσει και να δώσει σε γραφική παράσταση την κατανομή θερμοκρασίας στη στήλη (διάγραμμα θερμοκρασίας συναρτήσει του αριθμού δίσκου), καθώς επίσης και τις συστάσεις της υγρής φάσης σε κάθε βαθμίδα.

Το πρόγραμμα μπορεί να χρησιμοποιηθεί ευθέως για την αξιολόγηση μιας υπάρχουσας αποστακτικής στήλης, με τον υπολογισμό των συστάσεων των προϊόντων κορυφής και πυθμένα για δοσμένη τροφοδοσία, πίεση λειτουργίας, συνολική παροχή προϊόντος κορυφής και παροχή αναρροής. Θα μπορούσε επίσης να χρησιμοποιηθεί για το σχεδιασμό μιας νέας αποστακτικής στήλης με δοκιμή και σφάλμα. Στην περίπτωση αυτή ο χρήστης υποθέτει έναν αριθμό βαθμίδων και θέση τροφοδοσίας και για συγκεκριμένες προδιαγραφές λύνει το πρόβλημα αξιολόγησης όπως προηγουμένως. Με τον τρόπο αυτό μεταβάλλει τον αριθμό βαθμίδων και τη θέση της τροφοδοσίας μέχρις ότου επιτύχει τις επιθυμητές συστάσεις στα προϊόντα.

Πέραν των ανωτέρω, το πρόγραμμα δίνει τη δυνατότητα διερεύνησης της επίδρασης της μεταβολής ορισμένων παραμέτρων (που θεωρούνται ανεξάρτητες μεταβλητές εισόδου στο σύστημα) στη λειτουργία της στήλης, δηλαδή στην τιμή ορισμένων παραμέτρων που θεωρούνται εξαρτημένες μεταβλητές εξόδου από το σύστημα. Οι μεταβλητές εισόδου που μπορούν ανεξάρτητα να μεταβάλλονται είναι : η θερμική κατάσταση της τροφοδοσίας, η πίεση λειτουργίας, ο αριθμός θεωρητικών βαθμίδων, η θέση της τροφοδοσίας, η παροχή αναρροής και η παροχή του αποστάγματος. Οι εξαρτημένες μεταβλητές που μπορούν να μελετηθούν είναι κάθε φορά μερικές ή όλες οι μεταβλητές που περιέχονται στις εξής κατηγορίες :

Πρώτη ομάδα

- Θερμοκρασία αποστάγματος
- Θερμοκρασία υπολείμματος
- Θερμοκρασία ενός (οποιοδήποτε) δίσκου

Δεύτερη ομάδα

- Παροχή ατμών στο τμήμα εμπλουτισμού
- Παροχή υγρού στο τμήμα εξάντλησης
- Παροχή ατμών στο τμήμα εξάντλησης
- Παροχή υπολείμματος

Τρίτη ομάδα

- Συγκέντρωση ενός συστατικού (οποιοδήποτε) στο απόσταγμα
- Συγκέντρωση ενός συστατικού στο υπόλειμμα
- Συγκέντρωση ενός συστατικού σε ένα (οποιοδήποτε) δίσκο

Τέταρτη ομάδα

- Φορτίο του αναβραστήρα
- Φορτίο του συμπυκνωτήρα

Για κάθε μια από τις ανεξάρτητες μεταβλητές εισόδου (μία κάθε φορά), ο χρήστης έχει τη δυνατότητα να καθορίσει τη μέγιστη και την ελάχιστη τιμή, καθώς και τον αριθμό βημάτων της μεταβολής της μεταβλητής μεταξύ των δύο αυτών τιμών. Ο χρήστης επιλέγει επίσης μια κάθε φορά ομάδα από τις ανωτέρω τέσσερις ομάδες εξαρτημένων μεταβλητών και μερικές ή όλες τις μεταβλητές μέσα στην ομάδα αυτή. Το πρόγραμμα, για όλες τις τιμές της ανεξάρτητης μεταβλητής που καθορίστηκαν, υπολογίζει τις αντίστοιχες τιμές των εξαρτημένων μεταβλητών που επελέγησαν, τις οποίες και δίνει σε γραφική μορφή.

8.2 Τρόπος χρήσης του προγράμματος

Κατωτέρω παρουσιάζεται αναλυτικά ο τρόπος επικοινωνίας χρήστη- προγράμματος και δίδονται παραδείγματα υπολογισμών, ώστε να γίνουν σαφέστερες οι δυνατότητές του. Ως εφαρμογή χρησιμοποιείται το πρόβλημα του παραδείγματος 1 που παρουσιάστηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο.

Αν κάποιος ανοίξει το αρχείο OPER1.XLS, το οποίο περιέχεται στη δισκέτα που εσωκλείεται στην εργασία, θα βρεθεί μπροστά στην εικόνα του σχήματος 8-1. Το κάθε κουμπί αντιπροσωπεύει και ένα “παράθυρο διαλόγου” (dialog-box) χρήστη-προγράμματος.

Παράμετρος	Μονάδα	Τιμή
F	kmole/h	100.00
q		1.000
P	atm	7.8
N		18
M		12
L	kmole/h	158.60
D	kmole/h	23.80

Σχήμα 8-1 : Το περιβάλλον επικοινωνίας χρήστη-προγράμματος.

Έτσι, για τον καθορισμό των παραμέτρων λειτουργίας της αποστακτικής στήλης, πιέζεται το κουμπί “**Προδιαγραφές**”. Το παράθυρο διαλόγου που εμφανίζεται περιέχει 7 από τις C+6 προδιαγραφές του προβλήματος δηλαδή τις μεταβλητές :

F, q, P, N, M, L, D

- όπου F : η γραμμομοριακή παροχή της τροφοδοσίας (kmole/h).
 q : η θερμική κατάσταση της τροφοδοσίας.
 P : η πίεση λειτουργίας της αποστακτικής στήλης (atm).
 N : ο αριθμός των θεωρητικών βαθμίδων της αποστακτικής στήλης περιλαμβάνει μερικό αναβραστήρα και μερικό συμπυκνωτήρα).
 M : ο αριθμός των θεωρητικών βαθμίδων κάτω από τη βαθμίδα τροφοδοσίας (περιλαμβάνει μερικό συμπυκνωτήρα).
 L : η γραμμομοριακή παροχή του υγρού στο τμήμα εμπλουτισμού της αποστακτικής στήλης (kmole/h).
 D : η γραμμομοριακή παροχή αποστάγματος της αποστακτικής στήλης (kmole/h).

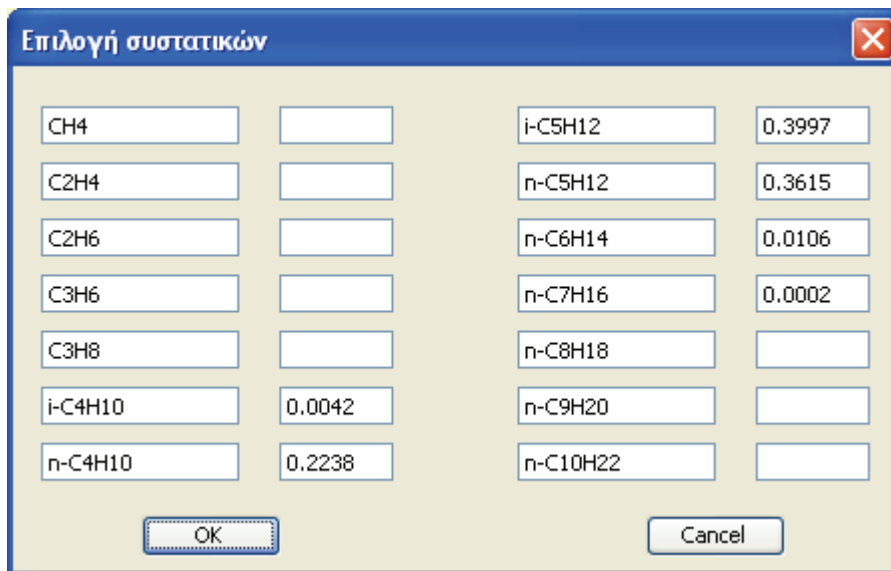
Περιλαμβάνει ακόμη, τον τύπο του συμπυκνωτήρα και του αναβραστήρα καθώς και τον αριθμό των συστατικών του μίγματος στην τροφοδοσία. Συμπληρώνεται για το παράδειγμα 1 όπως φαίνεται στο σχήμα 8-2.

Παράμετρος	Τύπος	Τιμή
Παροχή τροφοδοσίας	kmole/h	100
Θερμική κατάσταση τροφοδοσίας	q	1
Πίεση αποστακτικής Στήλης	atm	7.8
Αριθμός θεωρητικών βαθμίδων		18
Αριθμός θ.β. κάτω από την τροφοδοσία		12
Παροχή αποστάγματος	kmole/h	23.8
Παροχή αναρροής	kmole/h	158.6
Αριθμός συστατικών στην τροφοδοσία		6
Μερικός συμπυκνωτήρας	Checkbox	<input type="checkbox"/>
Μερικός αναβραστήρας	Checkbox	<input checked="" type="checkbox"/>

Σχήμα 8-2 : Το παράθυρο διαλόγου για τον καθορισμό των παραμέτρων λειτουργίας της αποστακτικής στήλης.

Τα συστατικά του ρεύματος τροφοδοσίας μπορεί να είναι οποιαδήποτε από τους παρακάτω 14 ελαφρούς υδρογονάνθρακες : Μεθάνιο, αιθυλένιο, αιθάνιο, προπυλένιο, προπάνιο, ισοβουτάνιο, κ-βουτάνιο, ισοπεντάνιο, κ-πεντάνιο, κ-εξάνιο, κ-επτάνιο, κ-οκτάνιο, κ-εννεάνιο, κ-δεκάνιο. Προκειμένου να γίνει η επιλογή των συστατικών και ο καθορισμός της σύστασης του ρεύματος τροφοδοσίας πιέζεται το κουμπί “**Επιλογή συστατικών**”. Το παράθυρο διαλόγου που εμφανίζεται συμπληρώνεται, για το πρόβλημα του παραδείγματος 1, όπως φαίνεται στο σχήμα 8-3.

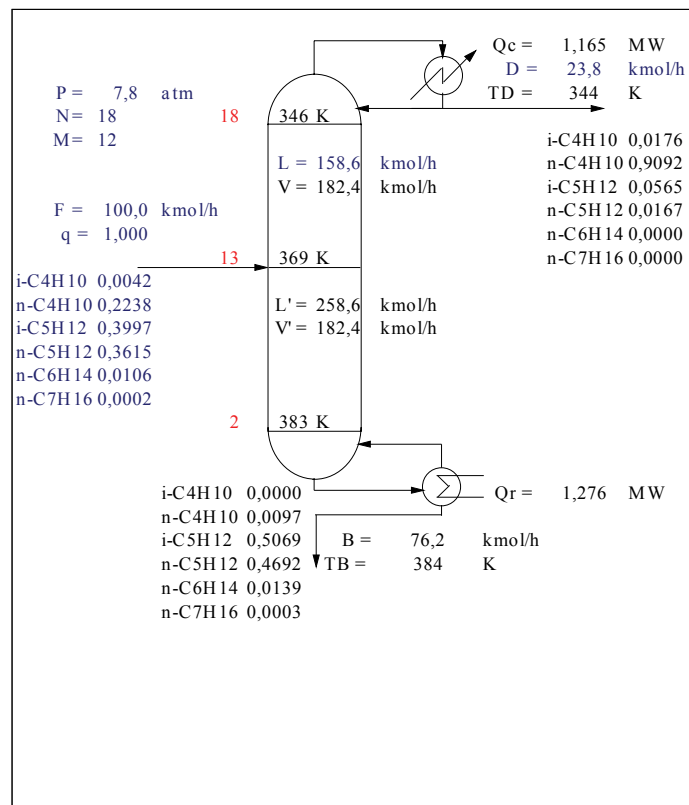
Οι προδιαγραφές έχουν καθοριστεί. Πιέζοντας το κουμπί “**Λύση**” το πρόγραμμα τρέχει. Μετά την ολοκλήρωση των υπολογισμών, τα αποτελέσματα των υπολογισμών εμφανίζονται σε ένα σχήμα αποστακτικής στήλης. Αυτό γίνεται πιέζοντας το κουμπί “**Αποτελέσματα**”, οπότε στην οθόνη εμφανίζεται το σχήμα 8-4.



Σχήμα 8-3 : Το παράθυρο διαλόγου για τον καθορισμό των συστατικών και της σύστασης του ρεύματος τροφοδοσίας της αποστακτικής στήλης.

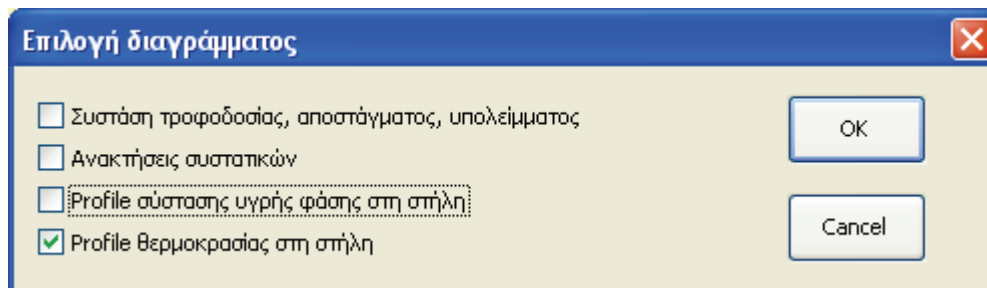
Στην οθόνη των αποτελεσμάτων, με μπλε χρωματισμό είναι οι προδιαγραφές (τα δεδομένα) του προβλήματος και με μαύρο οι μεταβλητές επίλυσης. Χρησιμοποιώντας τα κουμπιά που υπάρχουν στο μπλε φόντο του σχήματος 8-1, μπορούμε να αλλάξουμε όποια από τα δεδομένα του προβλήματος θέλουμε, οπότε αυτομάτως πάνω στο σχήμα της στήλης (σχήμα 8-4) αλλάζουν αντιστοίχως και τα αποτελέσματα.

Το σχήμα 8-4 εξαφανίζεται από την οθόνη πιέζοντας ξανά το κουμπί “Αποτελέσματα”.



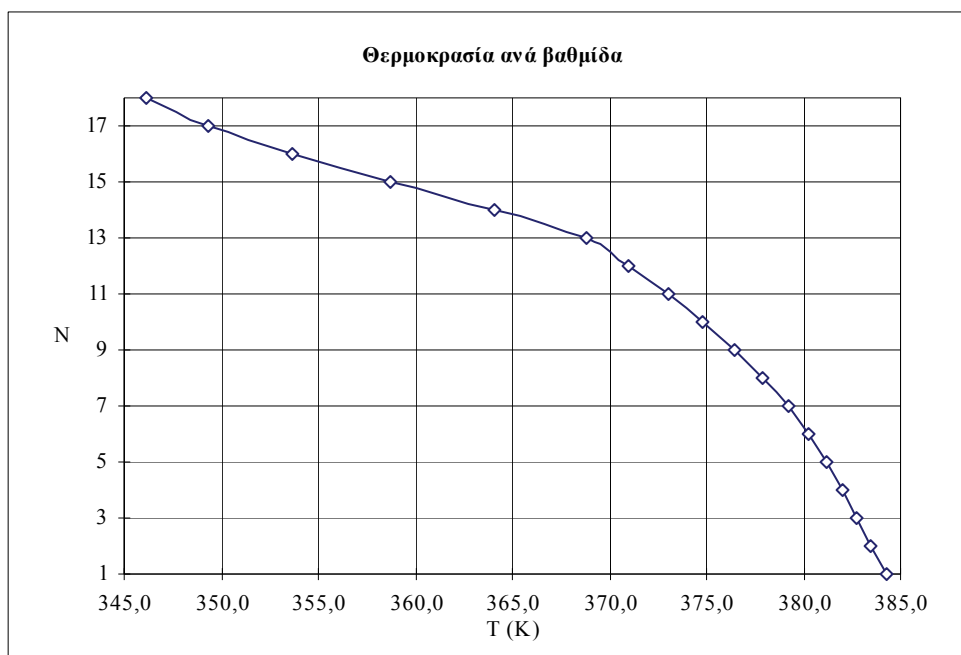
Σχήμα 8-4 : Τα αποτελέσματα των υπολογισμών για το παράδειγμα 1 πάνω σε σχήμα αποστακτικής στήλης.

Πιέζοντας το κουμπί “**Επιλογή διαγράμματος**” στην αρχική οθόνη (σχήμα 8-1), εμφανίζεται το παράθυρο διαλόγου του σχήματος 8-5. Παρατηρούμε ότι μπορούμε να παραστήσουμε γραφικά τα γραμμομοριακά κλάσματα στο ρεύμα τροφοδοσίας, στο απόσταγμα και στο υπόλειμμα, τις ανακτήσεις των συστατικών σε υπόλειμμα και απόσταγμα, το προφίλ της σύστασης της υγρής φάσης στο εσωτερικό της αποστακτικής στήλης καθώς και την κατανομή της θερμοκρασίας στη στήλη.



Σχήμα 8-5 : Το παράθυρο διαλόγου για την επιλογή διαγράμματος απεικόνισης αποτελεσμάτων.

Αν π.χ. επιλέξουμε το διάγραμμα κατανομής της θερμοκρασίας εντός της στήλης (σχήμα 8-5) και πιέσουμε το κουμπί “**Δ**” στην αρχική οθόνη, θα εμφανιστεί στην οθόνη το διάγραμμα που φαίνεται στο σχήμα 8-6.

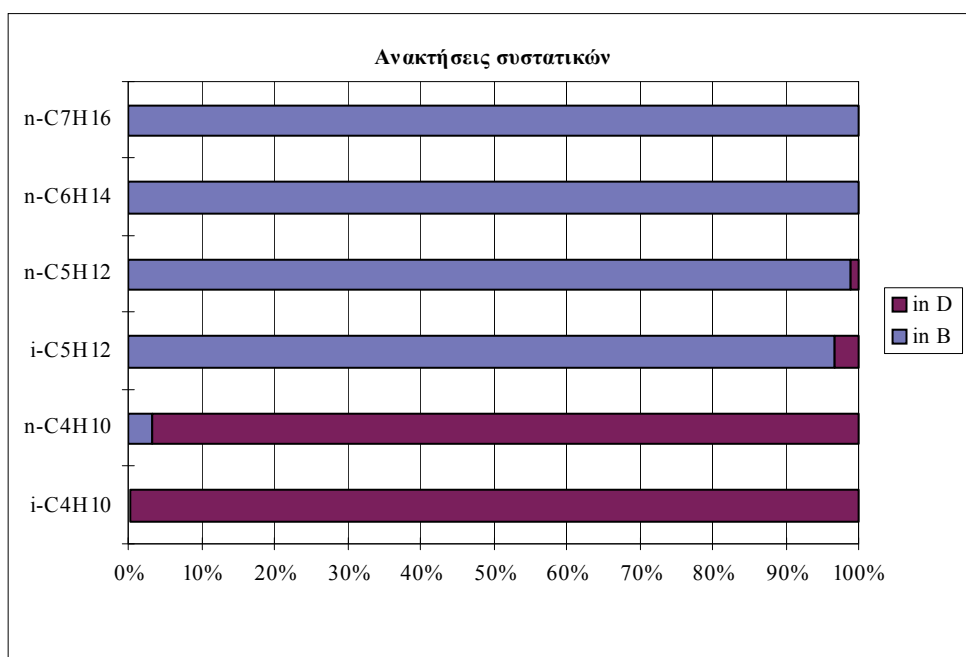


Σχήμα 8-6 : Γραφική απεικόνιση της κατανομής θερμοκρασίας εντός της στήλης για το παράδειγμα 1.

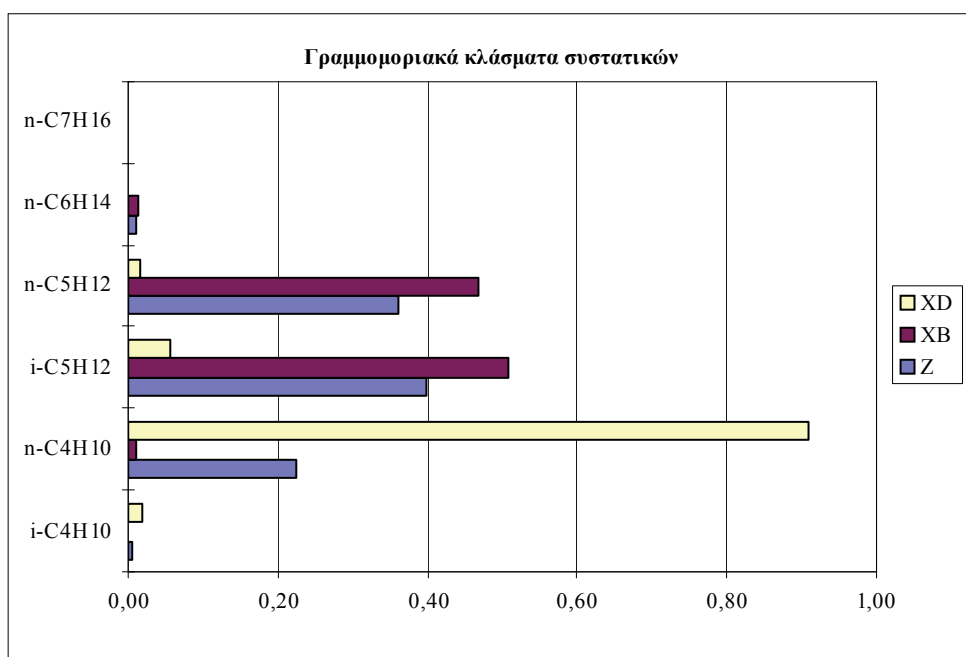
Σημειώνουμε ότι το διάγραμμα του σχήματος 8-6 εξαφανίζεται από την οθόνη πατώντας ξανά το κουμπί “**Δ**”. Στην οθόνη μπορεί να παρουσιάζεται ένα διάγραμμα κάθε φορά. Για αυτό θα πρέπει σε κάθε περίπτωση να φροντίζουμε να εξαφανίζουμε το διάγραμμα που υπάρχει στην οθόνη πριν επιχειρήσουμε να εμφανίσουμε κάποιο άλλο.

Αν στο παράθυρο διαλόγου του σχήματος 8-5 επιλέξουμε το διάγραμμα των ανακτήσεων στο απόσταγμα και στο υπόλειμμα ή τα γραμμομοριακά κλάσματα στο ρεύμα

τροφοδοσίας στο απόσταγμα και στο υπόλειμμα, και στη συνέχεια πιάσουμε το κουμπί “Δ”, προκύπτουν τα διαγράμματα των σχημάτων 8-7 και 8-8 αντίστοιχα.

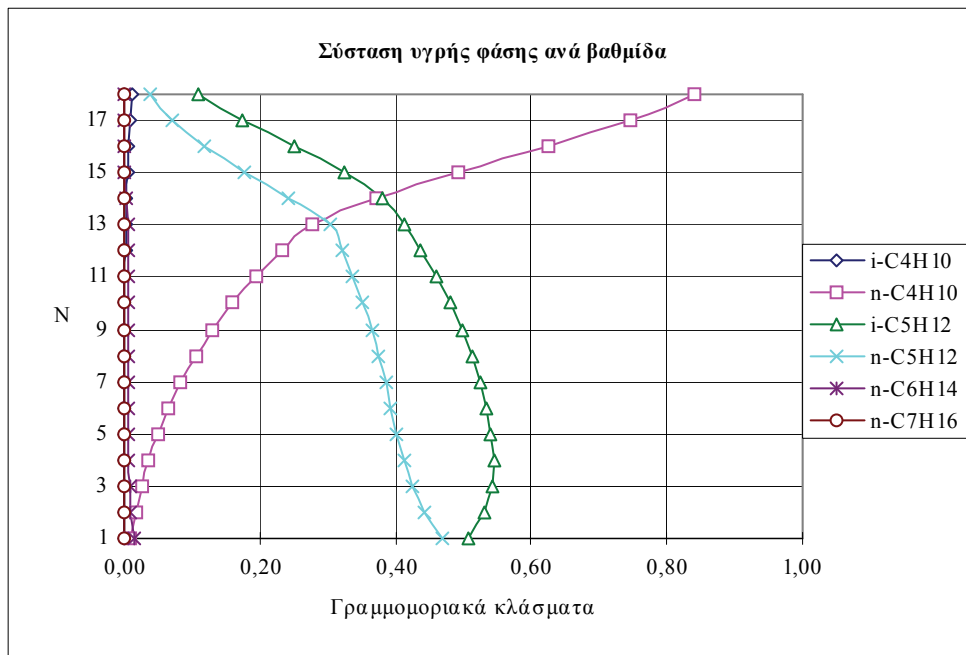


Σχήμα 8-7 : Ανακτήσεις συστατικών για το παράδειγμα 1.



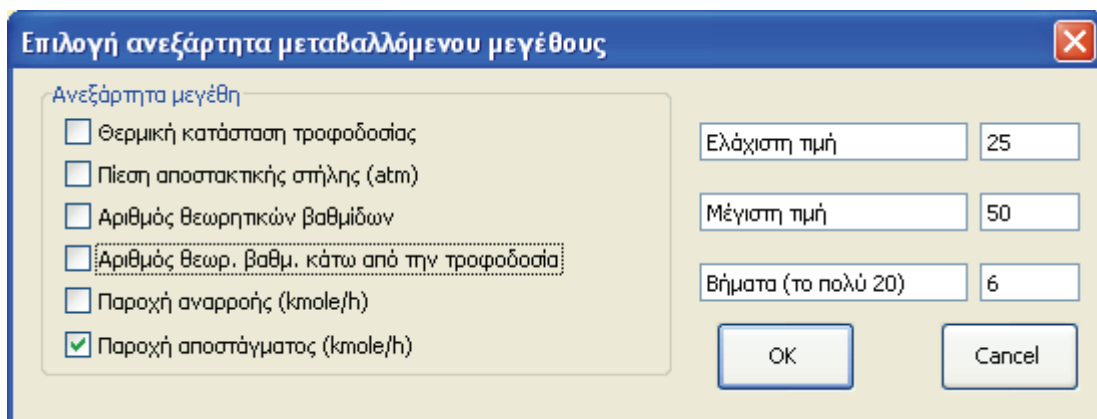
Σχήμα 8-8 : Γραμμομοριακά κλάσματα στο ρεύμα τροφοδοσίας, στο απόσταγμα και στο υπόλειμμα για το παράδειγμα 1.

Τέλος, αν επιλέξουμε το διάγραμμα του προφίλ της σύστασης της υγρής φάσης στο εσωτερικό της στήλης, και πιάσουμε το κουμπί “Δ”, εμφανίζεται στην οθόνη το διάγραμμα του σχήματος 8-9.



Σχήμα 8-9 : Κατανομή σύστασης της υγρής φάσης στο εσωτερικό της στήλης για το παράδειγμα 1.

Μια άλλη δυνατότητα που παρέχει το πρόγραμμα είναι η διερεύνηση της επίδρασης της μεταβολής ορισμένων από τα αρχικά δεδομένα του προβλήματος στα τελικά αποτελέσματα. Δηλαδή, υπάρχει η δυνατότητα να μεταβάλλουμε κάποιο από τα αρχικά δεδομένα διατηρώντας τα υπόλοιπα σταθερά και να παραστήσουμε γραφικά την επίδραση αυτής της μεταβολής στα αποτελέσματα. Πιέζοντας το κουμπί **“Επιλογή ανεξάρτητα μεταβαλλόμενου μεγέθους”** εμφανίζεται το παράθυρο διαλόγου που φαίνεται στο σχήμα 8-10. Επιλέγουμε την παράμετρο που επιθυμούμε να μελετήσουμε την επίδραση της μεταβολής της και σημειώνουμε τα όρια μεταβολής της καθώς και τον αριθμό των βημάτων μεταβολής (το πολύ 20). Έστω, ότι επιλέγουμε να μεταβάλλεται ανεξάρτητα η παροχή αποστάγματος από 25 έως 50 kmoles/h, σε 6 βήματα.



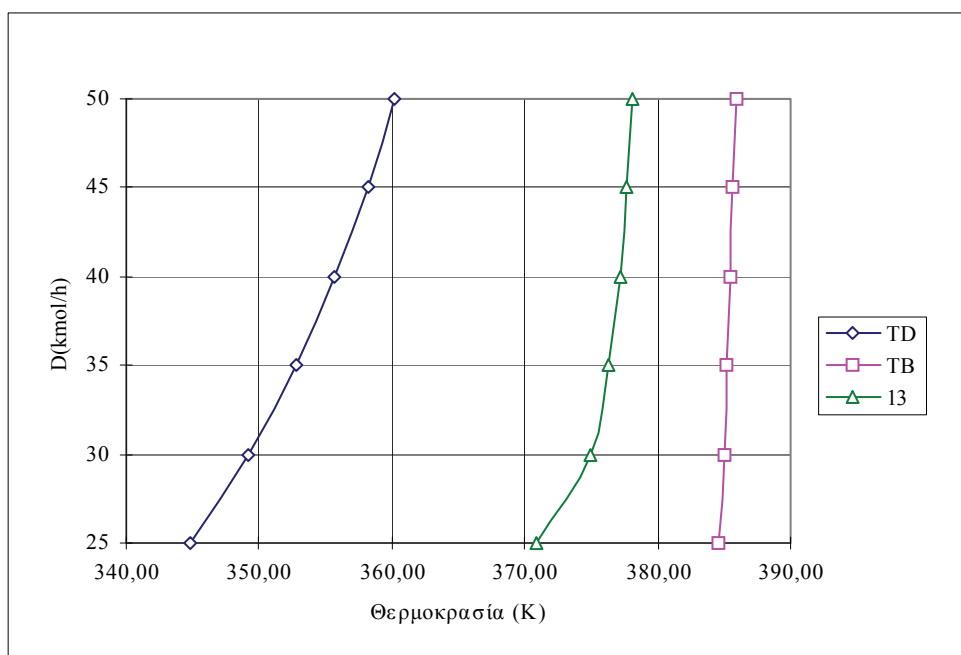
Σχήμα 8-10 : Το παράθυρο διαλόγου για την επιλογή της ανεξάρτητα μεταβαλλόμενης παραμέτρου, των ορίων και των βημάτων μεταβολής της.

Πιέζοντας το κουμπί **“Λύση”**, το πρόγραμμα τρέχει και επιλύει το πρόβλημα 6 φορές (όσες και τα βήματα μεταβολής). Αν μετά το τέλος της διαδικασίας πιέσουμε το κουμπί **“Επιλογή εξαρτημένου μεγέθους”**, εμφανίζεται στην οθόνη το παράθυρο διαλόγου του σχήματος 8-11. Μπορούμε να επιλέξουμε περισσότερες από μία εξαρτημένες μεταβλητές,

αρκεί να ανήκουν στην ίδια ομάδα. Οι 4 ομάδες μεταβλητών χωρίζονται μεταξύ τους με πλαίσια.

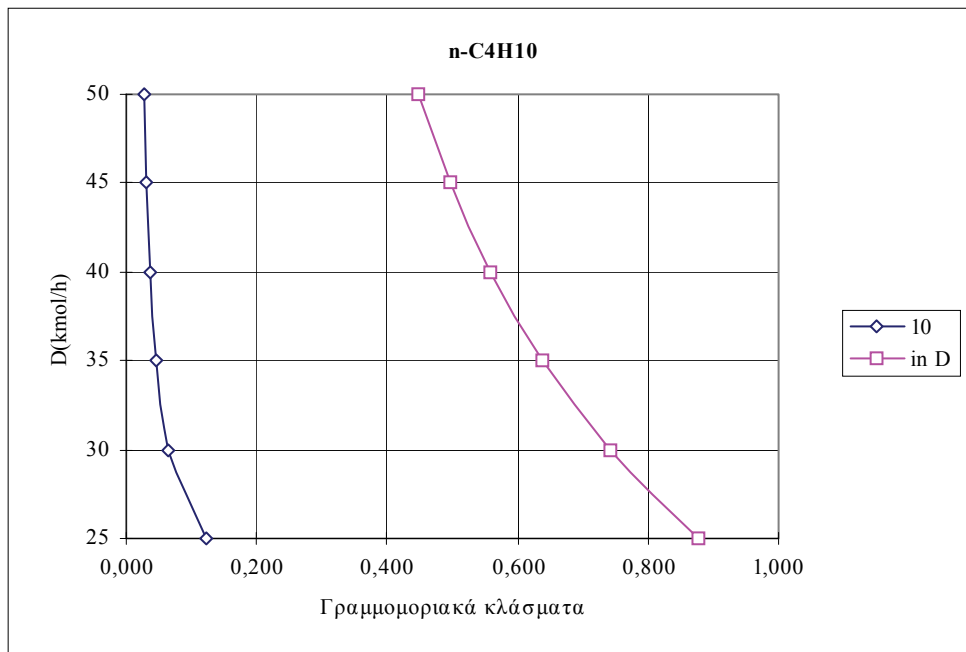
Σχήμα 8-11 : Το παράθυρο διαλόγου για την επιλογή της εξαρτημένης παραμέτρου.

Επιλέγοντας π.χ. ως εξαρτημένες μεταβλητές τη θερμοκρασία αποστάγματος, τη θερμοκρασία υπολείμματος και τη θερμοκρασία στη βαθμίδα 13, και πιέζοντας το κουμπί “ Δ ”, προκύπτει το διάγραμμα του σχήματος 8-12.



Σχήμα 8-12 : Γραφική απεικόνιση της μεταβολής των θερμοκρασιών αποστάγματος, υπολείμματος, και της βαθμίδας 13 ως συνάρτηση της παροχής αποστάγματος, για το παράδειγμα 1.

Αν πάλι επιλέξουμε ως εξαρτημένες μεταβλητές τα γραμμομοριακά κλάσματα στο απόσταγμα και στη βαθμίδα 10, και πιέσουμε το κουμπί “ Δ ”, προκύπτει το διάγραμμα του σχήματος 8-13.



Σχήμα 8-13 : Γραφική απεικόνιση της μεταβολής του γραμμομοριακού κλάσματος του κ-βουτανίου στο απόσταγμα και στη βαθμίδα 10 ως συνάρτηση της παροχής αποστάγματος, για το παράδειγμα 1.

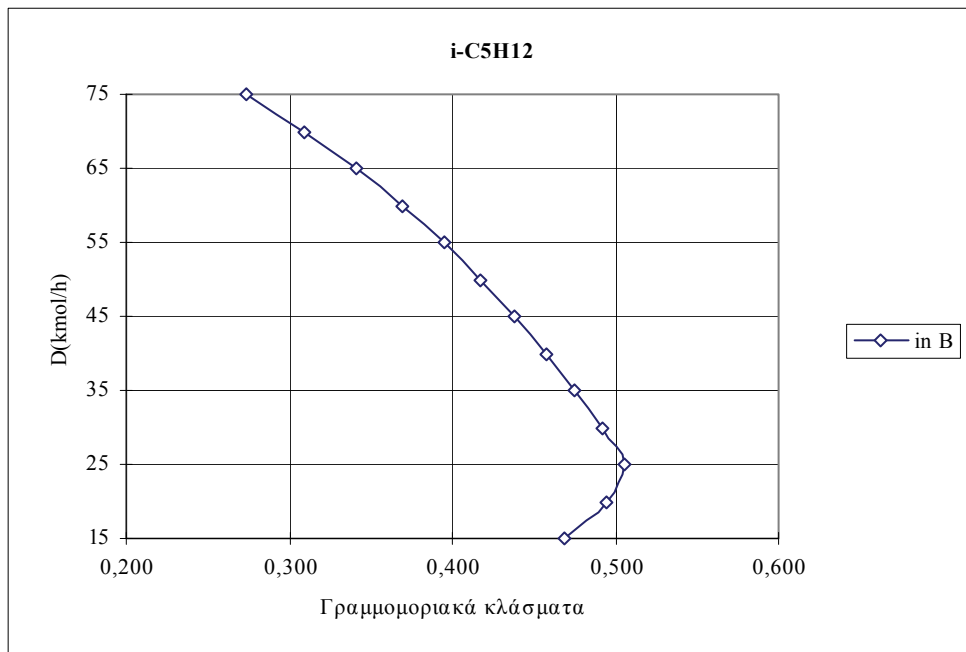
Είναι λοιπόν σχετικά εύκολο με το πρόγραμμα που αναπτύχθηκε να μελετηθεί η συμπεριφορά της αποστακτικής στήλης σε μόνιμη κατάσταση, αν κάποια από τις προδιαγραφές μεταβληθεί. Με άλλα λόγια, είναι δυνατό άμεσα να παρασταθεί γραφικά η μεταβολή οποιασδήποτε από τις μεταβλητές επίλυσης του μαθηματικού προτύπου ως συνάρτηση της μεταβολής κάποιας προδιαγραφής. Γνωρίζοντας αυτή τη σχέση μεταβολής μπορούμε να δώσουμε, μέσω παρατήρησης των αντίστοιχων γραφημάτων, απάντηση σε ερωτήματα του τύπου :

- α) Για ποια τιμή της παροχής αποστάγματος το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού Α γίνεται μέγιστο στο υπόλειμμα ;
- β) Ποια είναι η θέση της βαθμίδας τροφοδοσίας για την οποία το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού Γ στο απόσταγμα είναι το ελάχιστο δυνατό ;

Σημειώνεται ότι σε κάθε περίπτωση μία μόνο από τις προδιαγραφές μεταβάλλεται. Οι υπόλοιπες παραμένουν σταθερές. Παρακάτω δίδονται απαντήσεις σε ερωτήσεις όπως οι παραπάνω για το πρόβλημα του παραδείγματος 1. Πιο συγκεκριμένα, παρακάτω δίδονται προσεγγιστικά οι απαντήσεις στα ερωτήματα :

- α) Για ποια τιμή της παροχής αποστάγματος το γραμμομοριακό κλάσμα του ισοβουτανίου γίνεται μέγιστο στο υπόλειμμα ;

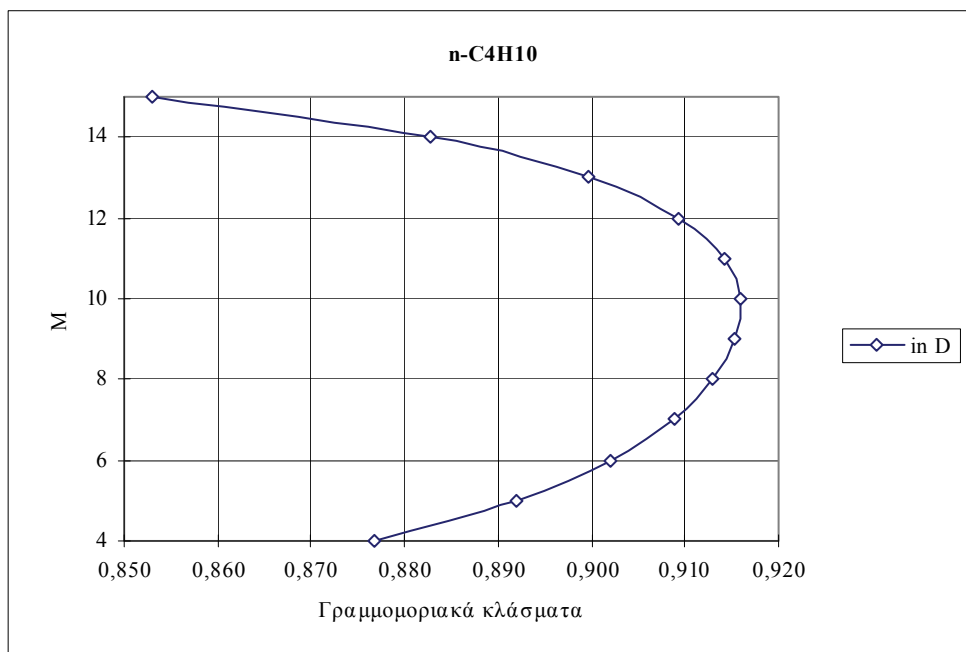
Χρησιμοποιώντας το πρόγραμμα προκύπτει το διάγραμμα του σχήματος 8-14.



Σχήμα 8-14 : Γραφική απεικόνιση της μεταβολής του γραμμομοριακού κλάσματος του ισοβουτανίου στο υπόλειμμα ως συνάρτηση της παροχής αποστάγματος, για το παράδειγμα 1.

Παρατηρούμε ότι το γραμμομοριακό κλάσμα του ισοβουτανίου στο υπόλειμμα είναι μέγιστο όταν η παροχή αποστάγματος είναι περίπου 25 kmole/h.

β) Ποια είναι η θέση της βαθμίδας τροφοδοσίας για την οποία το γραμμομοριακό κλάσμα του κ-βουτανίου γίνεται μέγιστο στο απόσταγμα ;



Σχήμα 8-15 : Γραφική απεικόνιση της μεταβολής του γραμμομοριακού κλάσματος του κ-βουτανίου στο απόσταγμα ως συνάρτηση της θέσης της βαθμίδας τροφοδοσίας, για το παράδειγμα 1.

Παρατηρούμε ότι το γραμμομοριακό κλάσμα του κ-βουτανίου στο απόσταγμα είναι το μέγιστο όταν στο τμήμα εξάντλησης υπάρχουν 10 βαθμίδες. Επειδή ο διαχωρισμός δεν εξαρτάται από τη θέση της βαθμίδας ισορροπίας αλλά από το λόγο M/N , η απάντηση στο β ερώτημα είναι ότι το γραμμομοριακό κλάσμα του κ-βουτανίου στο απόσταγμα γίνεται μέγιστο όταν ο λόγος M/N είναι περίπου 0,56.

9

Συμπεράσματα και προτάσεις

Στο κείμενο που ακολουθεί συνοψίζονται τα βασικά συμπεράσματα της διπλωματικής αυτής εργασίας και αναφέρονται σημεία που θα μπορούσαν να διερευνηθούν σε μελλοντικές εργασίες.

9.1 Συμπεράσματα

Στην εργασία αυτή αναπτύχθηκε ένα απλοποιημένο πρότυπο και το αντίστοιχο πρόγραμμα υπολογισμών το οποίο είναι δυνατό να αντιμετωπίσει προβλήματα προσομοίωσης λειτουργίας στη μόνιμη κατάσταση αποστακτικής στήλης με ιδανικές βαθμίδες, μιας τροφοδοσίας και δύο προϊόντων. Για τον υπολογισμό των λόγων ισορροπίας ατμών-υγρού το πρόγραμμα χρησιμοποιεί την εξίσωση που ανέπτυξε ο McWilliams για την προσέγγιση των διαγραμμάτων DePriester. Ως εκ τούτου, το μίγμα τροφοδοσίας μπορεί να είναι οποιοδήποτε των υδρογονανθράκων : Μεθάνιο, αιθυλένιο, αιθάνιο, προπυλένιο, προπάνιο, ισοβουτάνιο, κ-βουτάνιο, ισοπεντάνιο, κ-πεντάνιο, κ-εξάνιο, κ-επτάνιο, κ-οκτάνιο, κ-εννεάνιο, κ-δεκάνιο.

Τα σημεία τα οποία έχουν ιδιαίτερη σημασία είναι τα εξής :

1. Οι εξισώσεις του προτύπου που αναπτύσσεται και επιλύεται δεν είναι διαθέσιμες στη βιβλιογραφία. Δεν χρησιμοποιείται η απλοποιημένη μέθοδος Fenske-Underwood-Gilliland (FUG), διότι το ενδιαφέρον εστιάζεται στο ευθύ πρόβλημα το οποίο δύσκολα αντιμετωπίζεται από αυτή τη μέθοδο. Δεν χρησιμοποιείται ούτε η μέθοδος Smith-Brinkley (SB) που μπορεί να εφαρμοστεί στην επίλυση των προβλημάτων προσομοίωσης λειτουργίας στη μόνιμη κατάσταση. Κι αυτό γιατί ο στόχος δεν ήταν μόνο μία απλοποιημένη σχέση υπολογισμού των ανακτήσεων (όπως η SB), αλλά και ο προσεγγιστικός προσδιορισμός της κατανομής της θερμοκρασίας και, σε ειδικές περιπτώσεις, της σύστασης στο εσωτερικό της στήλης. Εξάλλου, δεν μπορούμε να γνωρίζουμε όλες τις παραδοχές που έγιναν για την εξαγωγή της βασικής εξίσωσης της SB, οι οποίες είναι σημαντικές για τα όρια εφαρμογής της και την αξιολόγηση των αποτελεσμάτων της.
Έτσι, η ανάπτυξη του προτύπου δεν είναι μόνο μια καταγραφή εξισώσεων αλλά περικλείει και την απόδειξη ορισμένων σχέσεων με βάση τις απλοποιητικές παραδοχές του προτύπου και τα ισοζύγια μάζας στο εσωτερικό της αποστακτικής στήλης.
2. Τα αποτελέσματα των υπολογισμών με βάση το απλοποιημένο πρότυπο που αναπτύχθηκε για 8 διαφορετικά παραδείγματα, συγκρίθηκαν με αυτά ενός αναλυτικού προτύπου, τα οποία υπολογίστηκαν με το εμπορικό πακέτο ASPEN PLUS. Από τη σύγκριση προκύπτει ότι το πρότυπο που αναπτύχθηκε δίνει πολύ ικανοποιητικά αποτελέσματα. Οι μέσες αποκλίσεις υπολογίστηκαν σε όρους $1000|\Delta x_i|$, για τα γραμμομοριακά κλάσματα και $|\Delta T|$ για την κατανομή θερμοκρασίας στο εσωτερικό της στήλης. Η μέση απόκλιση για τα γραμμομοριακά κλάσματα του υπολείμματος ήταν 7,5. Η μέση απόκλιση για τα γραμμομοριακά κλάσματα του αποστάγματος ήταν 10,3. Η μέση απόκλιση για την θερμοκρασία σε κάθε βαθμίδα ήταν 1,2.
3. Το απλοποιημένο μαθηματικό πρότυπο που αναπτύχθηκε αποτελεί μια νέα διαφορετική απλοποιημένη προσέγγιση του προβλήματος που καλείται να επιλύσει. Με δεδομένο ότι σήμερα στην πράξη έχουν κυριαρχήσει τα αναλυτικά πρότυπα, το απλοποιημένο πρότυπο της εργασίας μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε προκαταρκτικούς υπολογισμούς, αποκλείοντας λύσεις εμφανώς μη συμφέρουσες. Επίσης, παρέχει μια καλή αρχική εκτίμηση της λύσης, εξαιρετικά σημαντική για τη γρήγορη σύγκλιση με την αναλυτική μέθοδο. Τέλος, η χρήση του συνίσταται αντί αυτής ενός αναλυτικού προτύπου, όταν τα διαθέσιμα δεδομένα ισορροπίας ή ενθαλπίας δεν είναι ακριβή.
4. Το πρόγραμμα υλοποίησης της διαδικασίας επίλυσης, λόγω του εύχρηστου περιβάλλοντος επικοινωνίας χρήστη-προγράμματος και της δυνατότητας γραφικής απεικόνισης των αποτελεσμάτων, είναι δυνατό να αποτελέσει ένα εκπαιδευτικό πρόγραμμα. Σε αυτό θα

μπορεί κάποιος να επιβεβαιώνει ή να αναθεωρεί τις προβλέψεις του για τη συμπεριφορά της αποστακτικής στήλης στις μεταβολές των παραμέτρων λειτουργίας της.

9.2 Προτάσεις

Υπάρχουν αρκετές πτυχές της παρούσας εργασίας οι οποίες θα μπορούσαν να διερευνηθούν περαιτέρω. Οι πτυχές αυτές που σχετίζονται με βελτιώσεις και αναφέρονται σε νέες εφαρμογές του προγράμματος που αναπτύχθηκε, μνημονεύονται παρακάτω :

1. Χρήσιμα συμπεράσματα θα μπορούσαν να εξαχθούν για την αξιοπιστία του απλοποιημένου προτύπου που αναπτύσσεται μέσα από την αντιπαράθεση των αποτελεσμάτων του απλοποιημένου προτύπου που αναπτύχθηκε, όχι μόνο με αυτά μιας αναλυτικής μεθόδου, αλλά και με αυτά της μεθόδου FUG.
2. Στη παρούσα εργασία αντιμετωπίστηκε ένα πρόβλημα βαθμονόμησης-αξιολόγησης. Θα μπορούσε το πρότυπο που αναπτύχθηκε να χρησιμοποιηθεί και για την επίλυση προβλημάτων σχεδιασμού. Αυτό απαιτεί την κατάστρωση ενός κατάλληλου αλγορίθμου και την υλοποίηση του.
3. Θα μπορούσε να ληφθεί υπόψη στους υπολογισμούς και η δυναμικότητα της αποστακτικής στήλης που σχετίζεται άμεσα με τη διάμετρο. Θα μπορούσε δηλαδή η διάμετρος να αντικαταστήσει μία από τις προδιαγραφές στο πρόβλημα βαθμονόμησης-αξιολόγησης και να αποτελέσει μία μεταβλητή επίλυσης για το πρόβλημα σχεδιασμού.
4. Το μίγμα τροφοδοσίας μπορεί να είναι οποιοδήποτε περιέχει υδρογονάνθρακες της λίστας των 14 ελαφρών υδρογονανθράκων του διαγράμματος DePriester. Χρησιμοποιώντας μία άλλη μέθοδο υπολογισμού των λόγων ισορροπίας, η εφαρμογή του προτύπου θα μπορούσε να επεκταθεί και σε άλλα μίγματα.
5. Οι εφαρμογές του προτύπου και του αντίστοιχου προγράμματος θα είναι εξαιρετικά ενδιαφέρουσες αν στους υπολογισμούς εισαχθούν οικονομικά δεδομένα. Τότε θα είναι δυνατό να γίνει μια προκαταρκτική οικονομική ανάλυση της διεργασίας που μελετάται. Η αριστοποίηση της αντικειμενικής συνάρτησης θα μπορούσε, σε ένα πρόβλημα βαθμονόμησης-αξιολόγησης, να βοηθήσει στον προσδιορισμό των βέλτιστων συνθηκών λειτουργίας.

Βιβλιογραφία

A. Βιβλία

1. Λυγερός Α. , Μαρίνος-Κουρής Δ. :
Σημειώσεις Τεχνικής Φυσικών Διαχωρισμών
Αθήνα, 1988.
2. Μαρίνος-Κουρής Δ., Μαρούλης Ζ.Β :
Σχεδιασμός Χημικών Βιομηχανιών
Εκδόσεις Παπασωτηρίου, Αθήνα, 1993.
3. Μασαβέτας Κ. Αθ. :
Σημειώσεις Χημικής Θερμοδυναμικής
Αθήνα, 1992.
4. Σαραβάκος Γ. Δ. :
Τεχνική Φυσικών Διαχωρισμών
Β Έκδοση, Αθήνα, 1976.
5. Henley E.J. , Seader J.D. :
Equilibrium-Stage Separation Operations in Chemical Engineering
John Wiley & Sons, USA, 1981.
6. Holland C. D. :
Fundamentals of Multicomponent Distillation
Mc Graw-Hill, USA, 1981.
7. Jacobson Reed :
Microsoft Excel Visual Basic for Applications Step by Step (Version 5 for
Windows)
USA, 1994, Microsoft Press.
8. King C. J. :
Separation Processes
Second Edition, McGraw-Hill, USA, 1980.
9. Kister H. Z. :
Distillation Design
McGraw-Hill, USA, 1992.
10. Kister H. Z. :
Distillation Operation
McGraw-Hill, USA, 1990.
11. Microsoft Excel/Visual Basic Reference
Second edition, USA, 1995, Microsoft Press.
12. Microsoft Excel/Visual Basic Programmers's Guide
USA, 1995, Microsoft Press.

13. Perry R. H. , Green D. :
Perry's Chemical Engineers' Handbook
6th edition, McGraw-Hill, Malaysia, 1984.
14. Reid C. R. , Prausnitz J. M. , Poling B. E. :
The Properties of Gases and Liquids
4th edition, McGraw-Hill, Singapore, 1988.
15. Rose L. M. :
Distillation Design in Practice
Elsevier, New York, 1985.
16. Stephanopoulos G. :
Chemical Process Control. An introduction to Theory and Practice
Prentice Hall, USA, 1984.
17. Tassios D.P. :
Applied Chemical Engineering Thermodynamics
Springer-Verlag, 1993.
18. Treybal R. E. :
Mass-Transfer Operations
3rd edition, McGrawHill, 1980.
19. Van Winkle M. :
Distillation
McGraw-Hill, USA, 1967.
20. Visual Basic User's Guide (Microsoft Excel 5.0)
Ireland, 1994.
21. Wankat P. C. :
Equilibrium Staged Separations
Elsevier, 1988.

B. Άρθρα

1. Chang H. Y. :
Gilliland Plant in one Equation
Hydrocarbon Processing, October, 1981, p.146.
2. Eckert E. :
Global Approach to the Computation of Separations by Approximate methods
Chemical Engineering Science, 1982, Vol. 37, p.425.
3. Eckert E. and Hlavacek V. :
Calculation of Multicomponent Distillation of non-ideal Mixtures by a Short-cut Method
Chemical Engineering Science, 1978, Vol. 37, p. 425.

4. Mc Williams M. L. :
An Equation to Relate K-factors to Pressure and Temperature
Chem, Eng., October, 1973, p.138.
5. Rice V. L. :
Way to Predict Tray Temperatures
Hydrocarbon Processing, August, 1984, p.83.
6. Smith B. D. and Brinkley W. K. :
General Short-cut Equation for Equilibrium Stage Processes
A.I.Ch.E Journal, September, 1960, p.446.

Γ. Διπλωματικές εργασίες

1. Ζαρκαλής Γ. Χ. :
Σχεδιασμός Συστήματος Εμπειρογνώμονος για την Επιλογή Βέλτιστης Μεθόδου
Διαχωρισμού
Διπλωματική εργασία, Αθήνα, 1993.
2. Μαγουλάς Κ. :
Σχεδιασμός Μονάδας Σταθεροποίησης Νάφθας
Διπλωματική Εργασία, Αθήνα, 1983.

Παράρτημα

Παράρτημα 1

**Απόδειξη της απλοποιημένης σχέσης
υπολογισμού της σύστασης του υγρού ρεύματος
που αφήνει τη βαθμίδα m του τμήματος
εξάντλησης**

Κατά την ανάπτυξη της σχέσης υπολογισμού των συστάσεων της υγρής φάσης σε κάθε βαθμίδα του τμήματος εξάντλησης καταλήξαμε σε μία ακολουθία με γενικό όρο (εξίσωση 5-23) :

$$x_{i,m} = \left\{ 1 + \left(1 - \frac{1}{\bar{K}_i} \right) \left[\frac{S_{m,i}^m - S_{m,i}}{S_{m,i} - 1} \right] \right\} x_{i,B} \quad m=2,3,\dots,M \quad (\text{Π1-1})$$

Στις αντίστοιχες παραγράφους του κεφαλαίου 5, δεν αποδείξαμε ότι η σχέση (Π1-1) ισχύει για κάθε m , κάτι το οποίο θα κάνουμε παρακάτω επαγωγικά. Ακολουθούμε τα εξής βήματα :

1. Αποδεικνύουμε ότι η ισότητα (Π1-1) ισχύει για $m=2$.

Για $m=2$ η (Π1-1) γίνεται :

$$x_{i,2} = \left\{ 1 + \left(1 - \frac{1}{\bar{K}_i} \right) \left[\frac{S_{m,i}^2 - S_{m,i}}{S_{m,i} - 1} \right] \right\} x_{i,1} \Rightarrow$$

$$\bar{L} x_{i,2} + \bar{V} x_{i,1} = \bar{L} x_{i,1} + \bar{K}_i \bar{V} x_{i,1} \Rightarrow$$

$$\bar{L} x_{i,2} + \bar{V} x_{i,1} = \bar{L} x_{i,1} + \bar{V} y_{i,1}$$

Η τελευταία σχέση είναι το ισοζύγιο μάζας στην πρώτη βαθμίδα της αποστακτικής στήλης, δηλαδή ισχύει.

2. Υποθέτουμε ότι η σχέση (Π1-1) ισχύει για $m=2,3,\dots,k-1,k$ ($k < M$). Θα αποδείξουμε ότι ισχύει για $m=k+1$, δηλαδή :

$$x_{i,k+1} = \left\{ 1 + \left(1 - \frac{1}{\bar{K}_i} \right) \left[\frac{S_{m,i}^{k+1} - S_{m,i}}{S_{m,i} - 1} \right] \right\} x_{i,B}$$

Το ισοζύγιο μάζας για το συστατικό i στη βαθμίδα $m-1$ του τμήματος εξάντλησης εκφράζεται από τη σχέση 5-10 της παραγράφου 5.2.2 :

$$x_{i,m} = \left(1 + \frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}} \right) x_{i,m-1} - \left(\frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}} \right) x_{i,m-2} \quad (\text{Π1-2})$$

Άρα για $m=k+1$ η σχέση (Π1-2) γίνεται :

$$x_{i,k+1} = \left(1 + \frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}} \right) x_{i,k} - \left(\frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}} \right) x_{i,k-1} \quad (\text{Π1-3})$$

Έχουμε υποθέσει ότι η (Π1-1) ισχύει για $m=k-1, k$, δηλαδή :

$$x_{i,k-1} = \left\{ 1 + \left(1 - \frac{1}{\bar{K}_i} \right) \left[\frac{S_{m,i}^{k-1} - S_{m,i}}{S_{m,i} - 1} \right] \right\} x_{i,B} \quad (\text{Π1-4})$$

$$x_{i,k} = \left\{ 1 + \left(1 - \frac{1}{\bar{K}_i} \right) \left[\frac{S_{m,i}^k - S_{m,i}}{S_{m,i} - 1} \right] \right\} x_{i,B} \quad (\text{Π1-5})$$

Συνδυάζοντας τις σχέσεις (Π1-3), (Π1-4), (Π1-5) προκύπτει ότι :

$$x_{i,k+1} = \left\{ 1 + \left(1 - \frac{1}{\bar{K}_i} \right) \left[\frac{S_{m,i}^{k+1} - S_{m,i}}{S_{m,i} - 1} \right] \right\} x_{i,B}$$

δηλαδή αυτό που θέλαμε να αποδείξουμε. Επομένως η σχέση (Π1-1) ισχύει για κάθε $m = 2, 3, \dots, M$.

Η ισχύς της αντίστοιχης σχέσης για το τμήμα εμπλουτισμού αποδεικνύεται με τον ίδιο τρόπο.

Παράρτημα 2

**Απόδειξη της απλοποιημένης
σχέσης υπολογισμού των ανακτήσεων των
συστατικών στο υπόλειμμα**

Η εξίσωση η οποία αποτελεί τη βάση για την απόδειξη της απλοποιημένης εξίσωσης υπολογισμού της ανάκτησης του συστατικού i στο υπόλειμμα είναι αυτή που εκφράζει το ισοζύγιο μάζας για το συστατικό i στη βαθμίδα τροφοδοσίας [εξίσωση (5-43)] :

$$x_{i,M+1} = \frac{F}{\bar{L} + K_{i,M+1}V} z_i + \frac{L}{\bar{L} + K_{i,M+1}V} x_{i,M+2} + \frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L} + K_{i,M+1}V} x_{i,M} \quad (\text{Π2-1})$$

Το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στο υγρό ρεύμα που αφήνει τη βαθμίδα τροφοδοσίας δίδεται από το ισοζύγιο μάζας αυτού του συστατικού στα όρια του τμήματος εξάντλησης, δηλαδή από την εξίσωση (5-45) :

$$x_{i,M+1} = \left(\frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}} \right) x_{i,M} + \left(\frac{B}{\bar{L}} \right) x_{i,B} \quad (\text{Π2-2})$$

Το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στο υγρό ρεύμα που αφήνει τη βαθμίδα M του τμήματος εξάντλησης, μπορεί να υπολογιστεί με βάση την εξίσωση (5-23), αν όπου m θέσουμε M :

$$x_{i,M} = \left\{ 1 + \left(1 - \frac{1}{\bar{K}_i} \right) \left[\frac{S_{m,i}^M - S_{m,i}}{S_{m,i} - 1} \right] \right\} x_{i,B} \quad (\text{Π2-3})$$

Το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στο υγρό ρεύμα που αφήνει τη βαθμίδα $M+2$ του τμήματος εμπλουτισμού, μπορεί να υπολογιστεί με βάση την εξίσωση (5-41), αν όπου n θέσουμε $M+2$:

$$x_{i,M+2} = \left\{ 1 + (1 - K_i) \left[\frac{\left(\frac{1}{S_{n,i}} \right)^{N+1-(M+2)} - \frac{1}{S_{n,i}}}{\frac{1}{S_{n,i}} - 1} \right] \right\} \frac{x_{i,D}}{K_i} \quad (\text{Π2-4})$$

Μέσω του προγράμματος DERIVE γίνεται η αντικατάσταση των $x_{i,M+1}$, $x_{i,M}$, $x_{i,M+2}$ από τις εξισώσεις (Π2-2), (Π2-3), (Π2-4) αντίστοιχα, στην (Π2-1). Στην πολύπλοκη εξίσωση που προκύπτει αντικαθίσταται το $x_{i,D}$ από την εξίσωση που εκφράζει το ισοζύγιο μάζας για το συστατικό i στα όρια της αποστακτικής στήλης :

$$z_i F = B x_{i,B} + D x_{i,D} \quad (\text{Π2-5})$$

Επίσης, αντικαθίστανται τα D , $S_{m,i}$ και $S_{n,i}$ από τις παρακάτω εξισώσεις :

$$D = V - L \quad (\text{Π2-6})$$

$$S_{m,i} = \frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}} \quad (\text{Π2-7})$$

$$S_{n,i} = \frac{K_i V}{L} \quad (\text{Π2-8})$$

Και αυτή η δεύτερη φάση αντικαταστάσεων γίνεται μέσω του προγράμματος DERIVE. Στη συνέχεια, επιλύεται (και πάλι μέσω του DERIVE) η εξίσωση που έχει προκύψει από τις αντικαταστάσεις, ως προς $\frac{B x_{i,B}}{F z_i}$. Η εξίσωση στην οποία καταλήγουμε είναι η παρακάτω :

$$\frac{B x_{i,B}}{F z_i} = \frac{(1 - S_{n,i}^{N-M}) + R(1 - S_{n,i})}{(1 - S_{n,i}^{N-M}) + R(1 - S_{n,i}) + h_i S_{n,i}^{N-M} \left[1 - S_{m,i}^{M+1} \left(\frac{\bar{K}_i - 1}{\bar{K}_i - S_{m,i}} \right) \right]} \quad (\text{Π2-9})$$

όπου

$$h_i = \frac{K_{i,M+1}}{K_i} \left[\frac{L(1 - S_{n,i})}{\bar{L}(1 - S_{m,i})} \right] \quad (\text{Π2-10})$$

$$S_{m,i} = \frac{\bar{K}_i \bar{V}}{\bar{L}} \text{ ο παράγοντας εξάντλησης στο κάτω τμήμα της στήλης.}$$

$$S_{n,i} = \frac{K_i V}{L} \text{ ο παράγοντας εξάντλησης στο άνω τμήμα της στήλης.}$$

$$R = \frac{L}{D} \text{ ο εξωτερικός λόγος αναρροής της στήλης.}$$

$$\frac{B x_{i,B}}{F z_i} = r_{i,B} \text{ η ανάκτηση του συστατικού } i \text{ στο υπόλειμμα.}$$

και

- \bar{K}_i : ο φαινόμενος λόγος ισορροπίας του συστατικού i στο τμήμα εξάντλησης.
- K_i : ο φαινόμενος λόγος ισορροπίας του συστατικού i στο τμήμα εμπλουτισμού.
- $K_{i,M+1}$: ο λόγος ισορροπίας του συστατικού i στη βαθμίδα τροφοδοσίας $(M+1)$.
- F : η γραμμομοριακή παροχή του ρεύματος τροφοδοσίας (kmoles/h).
- B : η γραμμομοριακή παροχή υπολείμματος (kmoles/h).
- D : η γραμμομοριακή παροχή αποστάγματος (kmoles/h).
- L : η γραμμομοριακή παροχή υγρού στο τμήμα εμπλουτισμού της αποστακτικής στήλης (kmoles/h).
- \bar{L} : η γραμμομοριακή παροχή υγρού στο τμήμα εξάντλησης της αποστακτικής στήλης (kmoles/h).
- V : η γραμμομοριακή παροχή ατμών στο τμήμα εμπλουτισμού της αποστακτικής στήλης (kmoles/h).
- \bar{V} : η γραμμομοριακή παροχή ατμών στο τμήμα εξάντλησης της αποστακτικής στήλης (kmoles/h).

Παράρτημα 3

Τρόπος υπολογισμού των λόγων ισορροπίας και των ειδικών ενθαλπιών

Οι λόγοι ισορροπίας δεν είναι στη γενική περίπτωση συναρτήσεις μόνο της πίεσης και της θερμοκρασίας. Ωστόσο, για μίγματα συστατικών παρόμοιας μοριακής δομής και μεγέθους οι λόγοι ισορροπίας εξαρτώνται κυρίως από την πίεση και τη θερμοκρασία. Η ειδική ενθαλπία μίγματος δεν είναι πάντα εξάρτηση μόνο της σύστασης και της θερμοκρασίας. Οι παραδοχές που γίνονται καθώς και ο τρόπος υπολογισμού περιγράφονται παρακάτω.

A. Υπολογισμός λόγων ισορροπίας

Ο υπολογισμός των λόγων ισορροπίας των συστατικών του προς διαχωρισμό μίγματος γίνεται μέσω της αναλυτικής προσέγγισης των διαγραμμάτων DePriester, όπως αναπτύχθηκε από τον Mc Williams (Mc Williams, 1973) και τροποποιήθηκε σε μονάδες SI :

$$\ln K_i = \frac{\alpha_{1,i}}{T^2} + \frac{\alpha_{2,i}}{T} + \alpha_{3,i} + \beta_{1,i} \ln P + \frac{\beta_{2,i}}{P^2} + \frac{\beta_{3,i}}{P} \quad (\text{Π3-1})$$

όπου K_i : ο λόγος ισορροπίας του συστατικού i .

T : η θερμοκρασία σε K.

P : η πίεση σε kPa.

$\alpha_{k,i}, \beta_{k,i}$: συντελεστές στη σχέση υπολογισμού των λόγων ισορροπίας (McWilliams), χαρακτηριστικοί για το συστατικό i . Φαίνονται στον πίνακα Π3-1 ($k=1,2,3$).

Παρατηρήσεις

1. Η παραπάνω εξίσωση υπολογισμού λόγων ισορροπίας εφαρμόζεται για τους παρακάτω 14 ελαφρούς υδρογονάνθρακες : Μεθάνιο, αιθυλένιο, αιθάνιο, προπυλένιο, προπάνιο, ισοβουτάνιο, κ-βουτάνιο, ισοπεντάνιο, κ-πεντάνιο, κ-εξάνιο, κ-επτάνιο, κ-οκτάνιο, κ-εννεάνιο, κ-δεκάνιο.
2. Η συσχέτιση McWilliams για τον υπολογισμό των λόγων ισορροπίας προσεγγίζει ικανοποιητικά τα διαγράμματα DePriester όταν :

$$256 \text{ K} < T < 422 \text{ K}$$

$$\text{και } 100 \text{ kPa} < P < 830 \text{ kPa ή } 1 \text{ atm} < P < 8.3 \text{ atm}$$

3. Οι σταθερές του πίνακα Π3-1 προέρχονται από το άρθρο του Mc Williams M. L. : An Equation to Relate K-factors to Pressure and Temperature. Έχουν κατάλληλα μετατραπεί ώστε η πίεση και η θερμοκρασία της σχέσης (Π3-1) να είναι σε μονάδες SI.

Πίνακας Π3-1 : Σταθερές για τον υπολογισμό των λόγων ισορροπίας 14 υδρογονανθράκων με τη συσχέτιση του Mc Williams.

Συστατικά	α_1	α_2	α_3	β_1	β_2	β_3
Μεθάνιο	-90388,9	0	9,9727	-0,8951	2844,94	0
Αιθυλένιο	-185208,9	0	9,5409	-0,8468	2041,54	0
Αιθάνιο	-212113,7	0	9,6176	-0,8860	2330,59	0
Προπυλένιο	-285026,1	0	9,4138	-0,8787	2266,40	0
Προπάνιο	-299595,2	0	8,6370	-0,7698	0	47,5891
Ισοβουτάνιο	-360137,7	0	9,5071	-0,9221	0	0
κ-Βουτάνιο	-395233,6	0	9,8122	-0,9646	0	0
Ισοπεντάνιο	-457278,7	0	9,3794	-0,9316	0	0
κ-Πεντάνιο	-470645,3	0	9,0524	-0,8914	0	0
κ-Εξάνιο	-549044,1	0	8,6019	-0,8463	0	0
κ-Επτάνιο	-621544,1	0	8,0649	-0,7954	0	0
κ-Οκτάνιο	0	-4248,23	13,897	-0,7315	0	0
κ-Εννεάνιο	-787358,0	0	7,0025	-0,6782	0	0
κ-Δεκάνιο	0	-5422,48	15,1835	-0,7147	0	0

B. Υπολογισμός ειδικής ενθαλπίας μίγματος

Ο υπολογισμός της γραμμομοριακής ενθαλπίας μίγματος γίνεται θεωρώντας την αέρια φάση ως ιδανικό αέριο και την υγρή ως ιδανικό μίγμα.

Η γραμμομοριακή ενθαλπία του καθαρού συστατικού i , αν αυτό θεωρηθεί ιδανικό αέριο, εξαρτάται μόνο από τη θερμοκρασία και είναι :

$$h_{Vi}^o(T) = \int_{T_{ref}}^T C_{pv,i}^o dT$$

όπου T_{ref} : θερμοκρασία αναφοράς, στην οποία η ενθαλπία ιδανικού αερίου είναι μηδενική (K). Θεωρούμε ότι $T_{ref} = 273$ K.

$C_{pv,i}^o$: γραμμομοριακή ειδική θερμότητα του συστατικού i , αν αυτό

θεωρηθεί ιδανικό αέριο $\left(\frac{kJ}{kmole K} \right)$.

$h_{Vi}^o(T)$: η γραμμομοριακή ενθαλπία του καθαρού συστατικού i στη θερμοκρασία T (K), αν αυτό θεωρηθεί ιδανικό αέριο (kJ/kmole).

Αφού

$$C_{pv,i}^o = C_{1,i} + C_{2,i}T_f + C_{3,i}T_f^2 + C_{4,i}T_f^3 + C_{5,i}T_f^4$$

με $T_f = 1.8 T - 460$, T σε K

όπου $C_{k,i}$: σταθερές στη σχέση υπολογισμού της γραμμομοριακής ειδικής θερμότητας ιδανικού αερίου, που αντιστοιχεί στο καθαρό συστατικό i ($k=1,2,\dots,5$). Φαίνονται στον πίνακα Π3-2.

προκύπτει ότι :

$$h_{Vi}^o(T) = \sum_{k=1}^5 \frac{C_{k,i}(T_f^k - T_{f,ref}^k)}{k}$$

με $T_f = 1.8 T - 460$, T σε K

και $T_{f,ref} = 1.8 T_{ref} - 460$

όπου T_{ref} : θερμοκρασία αναφοράς, στην οποία η ενθαλπία ιδανικού αερίου είναι μηδενική (K). Θεωρούμε ότι $T_{ref} = 273$ K.

Η γραμμομοριακή ενθαλπία αερίου μίγματος σύστασης y_i σε θερμοκρασία T , αν αυτό θεωρηθεί ιδανικό αέριο (άρα και ιδανικό μίγμα) δίδεται από τη σχέση :

$$h_V(y_i, T) = \sum_{i=1}^C y_i h_{Vi}^o(T)$$

όπου y_i : το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στο αέριο μίγμα.

$h_V(y_i, T)$: γραμμομοριακή ενθαλπία αερίου μίγματος (kj/kmole) (το οποίο θεωρείται ιδανικό) σύστασης y_i σε θερμοκρασία T (K).

Η γραμμομοριακή ενθαλπία υγρού μίγματος σύστασης x_i σε θερμοκρασία T , αν αυτό θεωρηθεί ιδανικό δίδεται από τη σχέση :

$$h_L(x_i, T) = \sum_{i=1}^C x_i [h_{Vi}^o(T) - \lambda_i]$$

όπου x_i : γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στο υγρό μίγμα.

λ_i : γραμμομοριακή λανθάνουσα θερμότητα εξάτμισης του καθαρού συστατικού i (kj/kmole).

$h_L(x_i, T)$: γραμμομοριακή ενθαλπία υγρού μίγματος (kj/kmole) (το οποίο θεωρείται ιδανικό) σύστασης x_i σε θερμοκρασία T (K).

Όμως για ιδανικά μίγματα :

$$\lambda_i = R_g T^2 \left(\frac{d \ln P_i^s}{dT} \right)$$

όπου P_i^s : η τάση ατμών του συστατικού i (atm).

R_g : παγκόσμια σταθερά των αερίων ίση με $8.3144 \left(\frac{\text{kJ}}{\text{kmole K}} \right)$.

T : θερμοκρασία (K).

Εφόσον η τάση ατμών δίδεται από τη συσχέτιση Antoine :

$$\ln(P_i^s) = A_{1,i} - \frac{A_{2,i}}{A_{3,i} + T}$$

όπου P_i^s : η τάση ατμών του συστατικού i (atm).

$A_{k,i}$: σταθερές της εξίσωσης Antoine για τον υπολογισμό της τάσης ατμών του συστατικού i ($k=1,2,3$). Φαίνονται στον πίνακα Π3-3.
 T : θερμοκρασία (K).

προκύπτει ότι :

$$\lambda_i = \frac{A_{2,i}RT^2}{(T + A_{3,i})^2}$$

λ_i : γραμμομοριακή λανθάνουσα θερμότητα εξάτμισης του καθαρού συστατικού i (kJ/kmole).

R_g : παγκόσμια σταθερά των αερίων ίση με $8.3144 \left(\frac{\text{kJ}}{\text{kmole K}} \right)$.

$A_{k,i}$: σταθερές της εξίσωσης Antoine για τον υπολογισμό της τάσης ατμών του συστατικού i ($k=2,3$). Φαίνονται στον πίνακα Π3-3.

T : θερμοκρασία (K) .

Παρατηρήσεις

1. Η σχέση υπολογισμού των ειδικών ενθαλπιών δίδει ικανοποιητικά αποτελέσματα μόνο σε χαμηλές πιέσεις. Το μαθηματικό πρότυπο περιλαμβάνει τους υπολογισμούς των φορτίων στον συμπυκνωτήρα και στον αναβραστήρα με σκοπό όχι να προσεγγιστεί η πραγματική τους τιμή, αλλά να προσδιοριστεί η τάξη μεγέθους τους.
2. Οι σταθερές των πινάκων Π3-2 και Π3-3 προέρχονται από το βιβλίο των Henley E.J. , Seader J.D. : Equilibrium-Stage Separation Operations in Chemical Engineering. Έχουν κατάλληλα μετατραπεί ώστε να δίνουν αποτελέσματα σε μονάδες SI.

Πίνακας Π3-2: Σταθερές για τον υπολογισμό των γραμμομοριακών ειδικών θερμοτήτων ιδανικών αερίων (για 14 υδρογονάνθρακες).

Συστατικά	C_1	C_2	C_3	C_4	C_5
Μεθάνιο	19,17839	8,85E-03	2,06E-05	-1,74E-08	4,2402E-12
Αιθυλένιο	21,69232	3,24E-02	2,35E-06	-1,75E-08	8,4093E-12
Αιθάνιο	26,78636	3,26E-02	1,99E-05	-2,57E-08	7,3553E-12
Προπυλένιο	31,70959	4,90E-02	5,81E-06	-2,67E-08	1,2205E-11
Προπάνιο	36,25497	5,83E-02	3,27E-05	-8,20E-08	4,3368E-11
Ισοβουτάνιο	47,4935	8,05E-02	3,29E-05	-9,88E-08	5,3428E-11
κ-Βουτάνιο	48,37575	7,31E-02	4,49E-05	-1,07E-07	5,5381E-11
Ισοπεντάνιο	58,02526	1,03E-01	1,64E-05	-7,78E-08	4,1275E-11
κ-Πεντάνιο	59,65322	0,090522	5,58E-05	-1,35899E-07	7,1639E-11
κ-Εξάνιο	70,19512	0,120935	7,09E-06	-6,42905E-08	3,1325E-11
κ-Επτάνιο	81,33661	1,42E-01	2,82E-06	-6,83E-08	3,3837E-11
κ-Οκτάνιο	92,52798	1,61E-01	-8,32E-05	-8,04E-08	4,0691E-11
κ-Εννεάνιο	103,7857	1,80E-01	6,89E-06	-9,62E-08	4,9177E-11
κ-Δεκάνιο	114,9541	2,00E-01	4,77E-06	-1,03E-07	5,249E-11

Πίνακας Π3-3 : Σταθερές της συσχέτισης Antoine για τον υπολογισμό της τάσης ατμών 14 υδρογονανθράκων.

Συστατικά	A₁	A₂	A₃
Μεθάνιο	5,14135	968,1322222	-3,72
Αιθυλένιο	5,27791	1427,218889	-14,308
Αιθάνιο	5,383894	1582,178333	-13,762222
Προπυλένιο	5,44467	1875,248333	-22,910056
Προπάνιο	5,353418	1872,824444	-25,101111
Ισοβουτάνιο	5,611805	2150,232778	-27,622778
κ-Βουτάνιο	5,741624	2292,436111	-27,862278
Ισοπεντάνιο	5,49978	2345,085556	-40,212778
κ-Πεντάνιο	5,853654	2554,603889	-36,252889
κ-Εξάνιο	6,039243	2825,421111	-42,708889
κ-Επτάνιο	5,98627	2932,723333	-55,635611
κ-Οκτάνιο	6,4141	3304,161667	-55,227778
κ-Εννεάνιο	6,22189	3290,363889	-71,505556
κ-Δεκάνιο	6,33557	3452,221111	-78,899333

Παράρτημα 4

Ο αλγόριθμος επίλυσης

Παρακάτω παρουσιάζεται αναλυτικά ο αλγόριθμος επίλυσης για ένα από τα προβλήματα εξομοίωσης λειτουργίας στη μόνιμη κατάσταση, με διδόμενες μεταβλητές τις :

$$F, q, z_i, P, N, M, L, D$$

Σημειώνεται ότι καθορίζονται C-1 γραμμομοριακά κλάσματα στην τροφοδοσία, αφού το τελευταίο είναι δυνατό να υπολογιστεί [Εξίσωση (1) πίνακα 6-1]. Τα βήματα της προτεινόμενης διαδικασίας επίλυσης είναι :

- Βήμα 1 : Εξίσωση (1) πίνακα 6-1 $\rightarrow z_k$
 Βήμα 2 : Εξίσωση (3) πίνακα 6-1 $\rightarrow B$
 Βήμα 3 : Εξίσωση (8) πίνακα 6-1 $\rightarrow R$
 Βήμα 4 : Εξίσωση (5) πίνακα 6-1 $\rightarrow V$
 Βήμα 5 : Εξίσωση (7) πίνακα 6-1 $\rightarrow \bar{L}$
 Βήμα 6 : Εξίσωση (6) πίνακα 6-1 $\rightarrow \bar{V}$
 Βήμα 7 : Υποθέτουμε $x_{i,B}$ ($i=1,2,\dots,C$).
 Βήμα 8 : Εξισώσεις (4i) πίνακα 6-1 $\rightarrow x_{i,D}$ ($i=1,2,\dots,C$)
 Βήμα 9 : Εξίσωση (9) πίνακα 6-1 $\rightarrow T_D$
 Βήμα 10 : Εξισώσεις (10i) πίνακα 6-1 $\rightarrow y_{i,N}$ ($i=1,2,\dots,C$)
 Βήμα 11 : Εξίσωση (11) πίνακα 6-1 $\rightarrow T_N$
 Βήμα 12 : Εξίσωση (12) πίνακα 6-1 $\rightarrow T_1$
 Βήμα 13 : Υποθέτουμε T_{FZ} .
 Βήμα 14 : Εξίσωση (13) πίνακα 6-1 $\rightarrow T_{n,\phi}$
 Βήμα 15 : Εξίσωση (14) πίνακα 6-1 $\rightarrow T_{m,\phi}$
 Βήμα 16 : Εξισώσεις (15i) πίνακα 6-1 $\rightarrow S_{n,i}$ ($i=1,2,\dots,C$)
 Βήμα 17 : Εξισώσεις (16i) πίνακα 6-1 $\rightarrow S_{m,i}$ ($i=1,2,\dots,C$)
 Βήμα 18 : Εξισώσεις (17i) πίνακα 6-1 $\rightarrow h_i$ ($i=1,2,\dots,C$)
 Βήμα 19 : Εξισώσεις (18i) πίνακα 6-1 $\rightarrow r_{i,B}$ ($i=1,2,\dots,C$)
 Βήμα 20 : Εξισώσεις (19i) πίνακα 6-1 $\rightarrow x_{i,B(NEW)}$ (νέες τιμές για τα $x_{i,B}$) ($i=1,2,\dots,C$)
 Βήμα 21 : Ελέγχουμε αν $\sum_{i=1}^C x_{i,B(NEW)} = 1$ [Εξίσωση (2) πίνακα 6-1]

Αν όχι, τότε επιλέγουμε νέα τιμή για την T_{FZ} και επιστρέφουμε στο βήμα 14.

Αν ναι, τότε συνεχίζουμε στο βήμα 22.

Βήμα 22 : Ελέγχουμε αν $x_{i,B(NEW)} = x_{i,B}$ ($i=1,2,\dots,C$)

$$\text{Αν όχι, τότε θέτουμε } x_{i,B(NEW)} = \frac{x_{i,B(NEW)}}{\sum_{i=1}^C x_{i,B(NEW)}} \quad (i=1,2,\dots,C)$$

και επιστρέφουμε στο βήμα 8.

Αν ναι, συνεχίζουμε στο βήμα 23.

- Βήμα 23 : Εξισώσεις (20im) πίνακα 6-2 $\rightarrow x_{i,m}$ ($m=2,3,\dots,M$ και $i=1,2,\dots,C$)
 Βήμα 24 : Εξισώσεις (21in) πίνακα 6-2 $\rightarrow x_{i,n}$ ($n=M+2,M+3,\dots,N-1$ και $i=1,2,\dots,C$)
 Βήμα 25 : Εξισώσεις (22i) πίνακα 6-2 $\rightarrow x_{i,N}$ ($i=1,2,\dots,C$)
 Βήμα 26 : Εξισώσεις (23i) πίνακα 6-2 $\rightarrow x_{i,M+1}$ ($i=1,2,\dots,C$)
 Βήμα 27 : Κανονικοποίηση των $x_{i,k}$ ($k=2,3,\dots,N-1$)
 Βήμα 28 : Εξισώσεις (24k) πίνακα 6-2 $\rightarrow T_k$ ($k=2,3,\dots,N-1$)

Αν ο συμπυκνωτήρας είναι μερικός και ο αναβραστήρας μερικός, τότε :

Βήμα 29 : Εξίσωση (25i) πίνακα 6-3 $\rightarrow y_{i,N-1}$ ($i=1,2,\dots,C$)

Βήμα 30 : Εξίσωση (26i) πίνακα 6-3 $\rightarrow y_{i,1}$ ($i=1,2,\dots,C$)

Βήμα 31 : Εξίσωση (28) πίνακα 6-3 $\rightarrow Q_c$

Βήμα 32 : Εξίσωση (29) πίνακα 6-3 $\rightarrow Q_r$

Αν ο συμπυκνωτήρας είναι μερικός και ο αναβραστήρας ολικός, τότε :

Βήμα 29 : Εξίσωση (25i) πίνακα 6-3 $\rightarrow y_{i,N-1}$ ($i=1,2,\dots,C$)

Βήμα 30 : Εξίσωση (27) πίνακα 6-3 $\rightarrow T_0$

Βήμα 31 : Εξίσωση (28) πίνακα 6-3 $\rightarrow Q_c$

Βήμα 32 : Εξίσωση (29) πίνακα 6-3 $\rightarrow Q_r$

Αν ο συμπυκνωτήρας είναι ολικός και ο αναβραστήρας ολικός, τότε :

Βήμα 29 : Εξίσωση (27) πίνακα 6-3 $\rightarrow T_0$

Βήμα 30 : Εξίσωση (28) πίνακα 6-3 $\rightarrow Q_c$

Βήμα 31 : Εξίσωση (29) πίνακα 6-3 $\rightarrow Q_r$

Αν ο συμπυκνωτήρας είναι ολικός και ο αναβραστήρας μερικός, τότε :

Βήμα 29 : Εξίσωση (26i) πίνακα 6-3 $\rightarrow y_{i,1}$ ($i=1,2,\dots,C$)

Βήμα 30 : Εξίσωση (28) πίνακα 6-3 $\rightarrow Q_c$

Βήμα 31 : Εξίσωση (29) πίνακα 6-3 $\rightarrow Q_r$

- όπου C : ο αριθμός των συστατικών του προς διαχωρισμό μίγματος.
 N : ο συνολικός αριθμός των θεωρητικών βαθμίδων της αποστακτικής στήλης (περιλαμβάνει μερικό αναβραστήρα και μερικό συμπυκνωτήρα).
 M : ο αριθμός των θεωρητικών βαθμίδων κάτω από τη βαθμίδα τροφοδοσίας (περιλαμβάνει μερικό αναβραστήρα).
 n : αύξων αριθμός θεωρητικής βαθμίδας στο τμήμα εμπλουτισμού (κυμαίνεται από $M+1$ έως $N-1$).
 m : αύξων αριθμός θεωρητικής βαθμίδας στο τμήμα εξάντλησης (κυμαίνεται από 2 έως M).

z_i : το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στο ρεύμα τροφοδοσίας.

$x_{i,B}$: το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στο υπόλειμμα.

$x_{i,D}$: το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στο απόσταγμα.

$x_{i,m}$: το γραμμομοριακό κλάσμα στην υγρή φάση του συστατικού i στη βαθμίδα m (η οποία βρίσκεται στο τμήμα εξάντλησης).

$x_{i,n}$: το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στην υγρή φάση στη βαθμίδα n (η οποία βρίσκεται στο τμήμα εμπλουτισμού).

$y_{i,k}$: το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στην ατμώδη φάση στη βαθμίδα k .

q : η θερμική κατάσταση τροφοδοσίας.

R : ο (εξωτερικός) λόγος αναρροής της αποστακτικής στήλης.

F : η γραμμομοριακή παροχή τροφοδοσίας της αποστακτικής στήλης (kmole/h).

B : η γραμμομοριακή παροχή υπολείμματος της αποστακτικής στήλης (kmole/h).

- D : η γραμμομοριακή παροχή αποστάγματος της αποστακτικής στήλης (kmole/h).
 L : η γραμμομοριακή παροχή του υγρού στο τμήμα εμπλουτισμού της αποστακτικής στήλης (kmole/h).
 V : η γραμμομοριακή παροχή των ατμών στο τμήμα εμπλουτισμού της αποστακτικής στήλης (kmole/h).
 \bar{L} : η γραμμομοριακή παροχή του υγρού στο τμήμα εξάντλησης της αποστακτικής στήλης (kmole/h).
 \bar{V} : η γραμμομοριακή παροχή των ατμών στο τμήμα εξάντλησης της αποστακτικής στήλης (kmole/h).
- P : η πίεση λειτουργίας της αποστακτικής στήλης (atm).
 T_D : η θερμοκρασία του αποστάγματος (K).
 T_k : η θερμοκρασία της βαθμίδας k της αποστακτικής στήλης (K).
 T_{FZ} : η θερμοκρασία της ζώνης τροφοδοσίας της αποστακτικής στήλης (K).
 T_0 : η θερμοκρασία του μίγματος ατμών που αφήνει τον αναβραστήρα όταν αυτός είναι ολικός (K).
 $T_{n,\phi}$: η φαινόμενη θερμοκρασία του τμήματος εμπλουτισμού που υπολογίζεται ως η αριθμητική μέση θερμοκρασία του τμήματος εμπλουτισμού (K).
 $T_{m,\phi}$: η φαινόμενη θερμοκρασία του τμήματος εξάντλησης που υπολογίζεται ως η αριθμητική μέση θερμοκρασία του τμήματος εξάντλησης (K).
- $S_{n,i}$: ο παράγοντας εξάντλησης του συστατικού i στο τμήμα εμπλουτισμού.
 $S_{m,i}$: ο παράγοντας εξάντλησης του συστατικού i στο τμήμα εξάντλησης.
 h_i : παράμετρος του συνόλου εξισώσεων της απλοποιημένης εξίσωσης υπολογισμού των ανακτήσεων των συστατικών στο υπόλειμμα, που αντιστοιχεί στο συστατικό i.
 $r_{i,B}$: η ανάκτηση του συστατικού i στο υπόλειμμα.
- Q_c : το φορτίο του συμπυκνωτήρα (kW).
 Q_r : το φορτίο του αναβραστήρα (kW).

Παράρτημα 5

Μέθοδοι σύγκλισης

Στον αλγόριθμο επίλυσης που παρουσιάστηκε στην παράγραφο 6.6 και αναλυτικότερα στο παράρτημα 4, υπάρχουν 2 επαναληπτικές διαδικασίες. Οι μέθοδοι που χρησιμοποιούνται για την πρόβλεψη των νέων τιμών σε αυτές τις διαδικασίες περιγράφονται παρακάτω :

A. Η θερμοκρασία της ζώνης τροφοδοσίας, T_{FZ} , μεταβάλλεται ώστε να “οδηγήσει” τη στήλη προς την προδιαγραφή της παροχής υπολείμματος. Αν στην επαναληπτική αυτή διαδικασία μεταβάλλουμε βηματικά τη θερμοκρασία T_{FZ} , καταναλώνουμε υπολογιστικό χρόνο που μπορούμε χρησιμοποιώντας κάποια άλλη μέθοδο σύγκλισης να κερδίσουμε. Η μέθοδος που χρησιμοποιείται για την πρόβλεψη της T_{FZ} είναι η μέθοδος false-position ή regula-falsi. Σύμφωνα με αυτή τη μέθοδο, η τιμή της T_{FZ} που προβλέπεται στην επανάληψη $k+2$ είναι :

$$T_{FZ}^{(k+2)} = T_{FZ}^{(k+1)} - f(T_{FZ}^{(k+1)}) \left[\frac{T_{FZ}^{(k+1)} - T_{FZ}^{(k)}}{f(T_{FZ}^{(k+1)}) - f(T_{FZ}^{(k)})} \right] \quad k=3,4,\dots$$

Η επαναληπτική διαδικασία σταματά όταν :

$$\frac{|T_{FZ}^{(k+2)} - T_{FZ}^{(k+1)}|}{T_{FZ}^{(k+1)}} \leq \text{TOL}$$

όπου $T_{FZ}^{(k+2)}$: η θερμοκρασία της ζώνης τροφοδοσίας που προβλέπεται με βάση τη μέθοδο σύγκλισης false-position στην επανάληψη $k+2$.

$T_{FZ}^{(k+1)}$: η θερμοκρασία της ζώνης τροφοδοσίας που προβλέπεται με βάση τη μέθοδο σύγκλισης false-position στην επανάληψη $k+1$.

$T_{FZ}^{(k)}$: η θερμοκρασία της βαθμίδας τροφοδοσίας που προβλέπεται με βάση τη μέθοδο σύγκλισης false-position στην επανάληψη k .

$f(T_{FZ}^{(k)})$: η διαφορά της υπολογιζόμενης τιμής παροχής υπολείμματος στην επανάληψη k από τη αυτή της επανάληψης $k-1$.

$f(T_{FZ}^{(k+1)})$: η διαφορά της υπολογιζόμενης τιμής παροχής υπολείμματος στην επανάληψη $k+1$ από τη αυτή της επανάληψης k .

TOL_1 : επιτρεπτό όριο σφάλματος στην τιμή της T_{FZ} .

Για να εφαρμοστεί η επαναληπτικός αλγόριθμος της μεθόδου false-position είναι απαραίτητες δύο αρχικές τιμές για τη θερμοκρασία T_{FZ} .

B. Για τους υπολογισμούς θερμοκρασίας σημείου φυσαλίδας και δρόσου ενός μίγματος χρησιμοποιείται η μέθοδος Newton-Raphson. Η τιμή της θερμοκρασίας σημείου φυσαλίδας στην επανάληψη $p+1$ είναι :

$$T_{BP}^{(p+1)} = T_{BP}^{(p)} - \frac{g(T_{BP}^{(p)})}{g'(T_{BP}^{(p)})} \quad p=2,3,\dots$$

Η επαναληπτική διαδικασία σταματά όταν :

$$\frac{|T_{BP}^{(p+1)} - T_{BP}^{(p)}|}{T_{BP}^{(p)}} \leq \text{TOL}_2$$

$$\text{όπου } g(T_{BP}^{(p)}) = 1 - \sum_{i=1}^c x_i K_i(P, T_{BP}^{(p)})$$

$T_{BP}^{(p+1)}$: η θερμοκρασία σημείου φουσαλίδας όπως προβλέπεται με βάση τη μέθοδο σύγκλισης Newton-Raphson στην επανάληψη $p+1$.

$T_{BP}^{(p)}$: η θερμοκρασία σημείου φουσαλίδας όπως προβλέπεται με βάση τη μέθοδο σύγκλισης Newton-Raphson στην επανάληψη p .

x_i : το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στο υγρό μίγμα, του οποίου τη θερμοκρασία σημείου φουσαλίδας αναζητούμε.

$g'(T_{BP}^{(p)})$: η τιμή της μερικής παράγωγου της $g(T_{BP}^{(p)})$ ως προς τη θερμοκρασία στο σημείο $T_{BP}^{(p)}$.

TOL_2 : επιτρεπτό όριο σφάλματος στην τιμή της T_{BP}

Για την εφαρμογή της μεθόδου Newton-Raphson είναι απαραίτητη και εξαιρετικά σημαντική για τη σύγκλιση μια αρχική τιμή για την T_{BP} .

Αντίστοιχες σχέσεις χρησιμοποιούνται και για τον υπολογισμό θερμοκρασίας σημείου δρόσου.

Στους υπολογισμούς σημείων φουσαλίδας και δρόσου, η μέθοδος Newton-Raphson εφαρμόζεται με επιτυχία όταν οι λόγοι ισορροπίας K_i είναι εκφρασμένοι αναλυτικά σε όρους θερμοκρασίας ή/και πίεσης (Henley, 1981).

Παράρτημα 6

**Αποτελέσματα, συγκρίσεις αποτελεσμάτων
και ανάλυση ευαισθησίας για 8 παραδείγματα**

Παρακάτω παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για τα 8 παραδείγματα που μελετήθηκαν. Επίσης, συγκρίνονται με αυτά μιας αναλυτικής μεθόδου και γίνεται μία μελέτη για την ευπάθειά τους στις αστοχίες εκτίμησης των λόγων ισορροπίας. Πριν την έκθεση των αποτελεσμάτων κρίνεται σκόπιμο να αναφερθούν τα παρακάτω :

1. Η αναλυτική μέθοδος που χρησιμοποιείται για την εκτίμηση της απόκλισης των εξαγομένων από το απλοποιημένο πρότυπο δεν περιλαμβάνει τις παραδοχές σταθερών γραμμομοριακών ροών και σταθερών σχετικών πτητικοτήτων σε κάθε τμήμα της στήλης. Ωστόσο, και στην αναλυτική μέθοδο η πίεση λειτουργίας θεωρείται σταθερή, ενώ οι βαθμίδες της στήλης θεωρητικές. Το πρότυπο που χρησιμοποιείται για την περιγραφή της ισορροπίας και την εκτίμηση των θερμοδυναμικών ιδιοτήτων (ενθαλπιών) είναι το PSRK (Predictive-Soave-Redlich-Kwong equation of state model), το οποίο αποτελεί μια επέκταση της καταστατικής εξίσωσης SRK. Οι υπολογισμοί της αναλυτικής μεθόδου διεξάγονται με το εμπορικό πακέτο υπολογισμών ASPEN PLUS.
2. Ως απόκλιση αποτελεσμάτων ορίζεται η απόκλιση αυτών της απλοποιημένης από αυτά της αναλυτικής μεθόδου. Έτσι, στους πίνακες αποτελεσμάτων που ακολουθούν ορίζονται οι αποκλίσεις :

$$1000 \Delta x_{i,B} = 1000 [x_{i,B}(\alpha\nu) - x_{i,B}(\alpha\pi)]$$

$$1000 \Delta x_{i,D} = 1000 [x_{i,D}(\alpha\nu) - x_{i,D}(\alpha\pi)]$$

και

$$\% | \Delta T_j | = \left| \frac{T_j(\alpha\nu) - T_j(\alpha\pi)}{T_j(\alpha\nu)} \right| 100\%$$

όπου $x_{i,B}$: το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στο υπόλειμμα
 $x_{i,D}$: το γραμμομοριακό κλάσμα του συστατικού i στο απόσταγμα.
 T_j : η θερμοκρασία στην βαθμίδα j (K).
 $\alpha\nu.$: αναλυτικής μεθόδου
 $\alpha\pi.$: απλοποιημένης μεθόδου

Ως μέση απόλυτη απόκλιση (ΜΕΣ.Α) ορίζουμε το μέσο όρο των απόλυτων τιμών των αντίστοιχων αποκλίσεων. Ως μέγιστη απόλυτη απόκλιση (ΜΕΓ.Α), ορίζεται η μέγιστη τιμή των απόλυτων τιμών των αποκλίσεων.

3. Η επίδραση της ακρίβειας υπολογισμού των λόγων ισορροπίας στα αποτελέσματα του απλοποιημένου προτύπου που αναπτύσσεται στην παρούσα εργασία, μελετάται θεωρώντας ότι οι τιμές των λόγων ισορροπίας κάθε συστατικού είναι κατά 5% και 10% μικρότεροι και μεγαλύτεροι σε σχέση με αυτές που προκύπτουν από τη συσχέτιση McWilliams.

Παράδειγμα 1

A. Εκφώνηση

Ζητούνται τα γραμμομοριακά κλάσματα στο απόσταγμα και στο υπόλειμμα και η κατανομή θερμοκρασίας εντός αποστακτικής στήλης που διαχωρίζει μίγμα τροφοδοσίας με γραμμομοριακή παροχή $F=100$ kmoles/h και σύσταση :

Πίνακας Π6-1 : Γραμμομοριακά κλάσματα των συστατικών του μίγματος τροφοδοσίας του παραδείγματος 1.

Συστατικά	z_i
Ισοβουτάνιο	0,0042
κ-Βουτάνιο	0,2238
Ισοπεντάνιο	0,3997
κ-Πεντάνιο	0,3615
κ-Εξάνιο	0,0106
κ-Επτάνιο	0,0002

Η τροφοδοσία είναι κορεσμένο υγρό, δηλαδή $q = 1$. Η πίεση λειτουργίας της στήλης είναι 7,8 atm και ο αριθμός των θεωρητικών βαθμίδων της είναι 18. Οι βαθμίδες κάτω από τη βαθμίδα τροφοδοσίας είναι 12. Η γραμμομοριακή παροχή του αποστάγματος είναι 23,8 kmoles/h και η παροχή της αναρροής είναι 158,6 kmoles/h. Ο αναβραστήρας της αποστακτικής στήλης είναι μερικός και ο συμπυκνωτήρας ολικός.

B. Αποτελέσματα και σύγκριση

Τα γραμμομοριακά κλάσματα αποστάγματος και υπολείμματος, όπως αυτά προκύπτουν από τα δύο πρότυπα, και οι αντίστοιχες αποκλίσεις φαίνονται στον πίνακα Π6-2 .

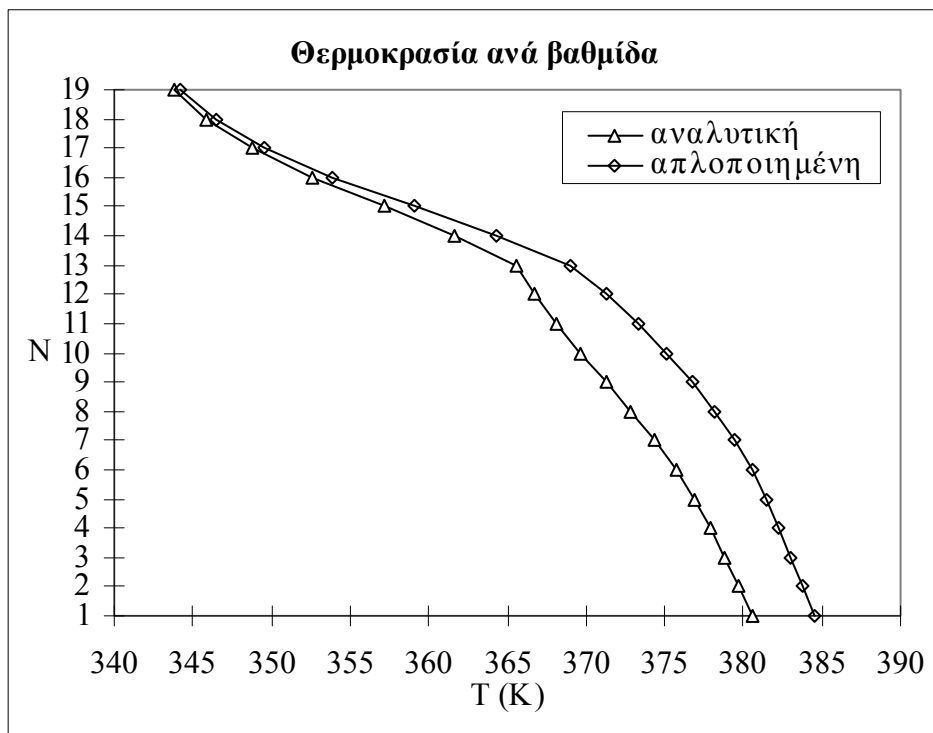
Πίνακας Π6-2 : Γραμμομοριακά κλάσματα υπολείμματος και αποστάγματος με βάση την απλοποιημένη και την αναλυτική μέθοδο και η μεταξύ τους απόκλιση για το παράδειγμα 1.

Συστατικά	$x_{i,B}$ (αν)	$x_{i,B}$ (απ)	$1000\Delta x_{i,B}$	$x_{i,D}$ (αν)	$x_{i,D}$ (απ)	$1000\Delta x_{i,D}$
Ισοβουτάνιο	0,0000	0,0000	0,0	0,0176	0.0176	-0.1
κ-Βουτάνιο	0,0127	0,0098	2,9	0,8996	0.9089	-9.3
Ισοπεντάνιο	0,5061	0,5068	-0,8	0,0592	0.0566	2.5
κ-Πεντάνιο	0,4670	0,4692	-2,1	0,0236	0.0168	6.8
κ-Εξάνιο	0,0139	0,0139	0,0	0,0000	0.0000	0.0
κ-Επτάνιο	0,0003	0,0003	0,0	0,0000	0.0000	0.0
		ΜΕΣ.Α	1,0		ΜΕΣ.Α	3,1
		ΜΕΓ.Α	2,9		ΜΕΓ.Α	9,3

Η κατανομή θερμοκρασίας εντός της αποστακτικής στήλης για κάθε μία από τις δύο προσεγγίσεις και η μεταξύ τους απόκλιση περιγράφεται στον πίνακα Π6-3 και απεικονίζεται στο σχήμα Π6-1.

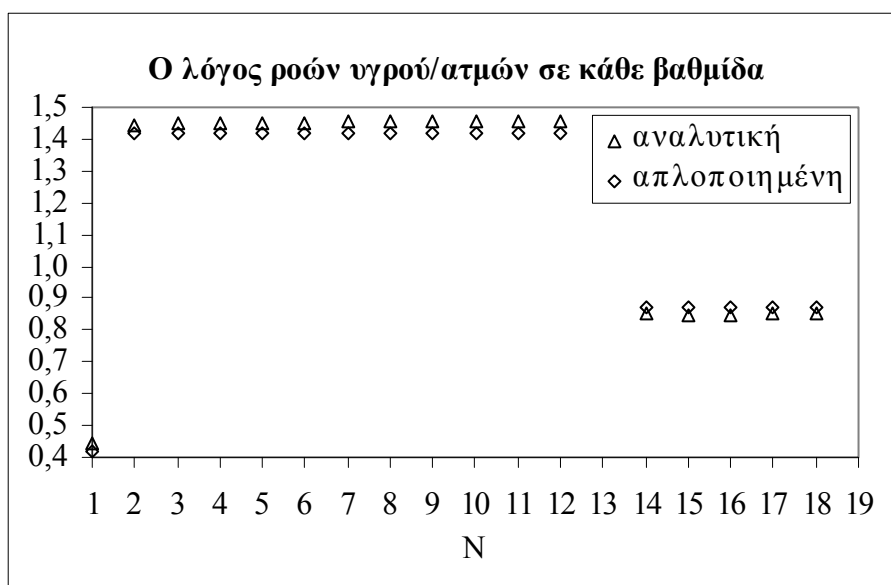
Πίνακας Π6-3 : Θερμοκρασία σε κάθε βαθμίδα της αποστακτικής στήλης με βάση την απλοποιημένη και την αναλυτική μέθοδο και η μεταξύ τους απόκλιση για το παράδειγμα 1.

N	T _i (αν)(K)	T _i (απ)(K)	% ΔT _i
1	380,6	384,5	1,0
2	379,7	383,7	1,1
3	378,9	383,0	1,1
4	377,9	382,3	1,1
5	376,9	381,5	1,2
6	375,7	380,5	1,3
7	374,3	379,4	1,4
8	372,9	378,2	1,4
9	371,3	376,8	1,5
10	369,7	375,1	1,5
11	368,2	373,3	1,4
12	366,8	371,3	1,2
13	365,6	369,1	1,0
14	361,6	364,3	0,8
15	357,1	359,0	0,5
16	352,6	353,9	0,4
17	348,8	349,6	0,2
18	345,8	346,4	0,2
19	343,8	344,2	0,1
	ΜΕΣ.Α		1,0
	ΜΕΓ.Α		1,5



Σχήμα Π6-1 : Κατανομή θερμοκρασίας εντός της αποστακτικής στήλης με βάση την απλοποιημένη και την αναλυτική μέθοδο για το παράδειγμα 1.

Ο λόγος των γραμμομοριακών ροών στο τμήμα εξάντλησης και στο τμήμα εμπλουτισμού φαίνεται στο σχήμα Π6-2.



Σχήμα Π6-2 : Μεταβολή του λόγου γραμμομοριακής ροής υγρού προς γραμμομοριακή ροή ατμών εντός της στήλης για το παράδειγμα 1.

Η μεταβολή των λόγων ισορροπίας στο εσωτερικό της στήλης για κάθε συστατικό φαίνεται στον πίνακα Π6-4.

Πίνακας Π6-4 : Μεταβολή των λόγων ισορροπίας με τη θερμοκρασία σε κάθε βαθμίδα για το παράδειγμα 1, όπως αυτή προβλέπεται από τη συσχέτιση McWilliams.

Συστατικό→ βαθμίδα ↓	Ισοβουτάνιο	κ-Βουτάνιο	Ισοπεντάνιο	κ-Πεντάνιο	κ-Εξάνιο	κ-Επτάνιο
1	2,496	2,011	1,069	0,921	0,467	0,235
2	2,469	1,988	1,055	0,908	0,459	0,230
3	2,447	1,968	1,042	0,897	0,453	0,227
4	2,424	1,947	1,030	0,886	0,446	0,223
5	2,399	1,925	1,016	0,874	0,439	0,219
6	2,370	1,900	1,001	0,861	0,431	0,215
7	2,336	1,870	0,983	0,845	0,422	0,209
8	2,298	1,837	0,962	0,827	0,412	0,204
9	2,254	1,798	0,939	0,806	0,400	0,197
10	2,204	1,755	0,913	0,783	0,386	0,189
11	2,149	1,707	0,884	0,758	0,372	0,181
12	2,089	1,655	0,853	0,730	0,356	0,173
13	2,025	1,599	0,820	0,701	0,340	0,164
14	1,890	1,482	0,751	0,640	0,306	0,145
15	1,744	1,357	0,678	0,576	0,270	0,126
16	1,608	1,241	0,611	0,518	0,239	0,110
17	1,496	1,147	0,558	0,472	0,214	0,097
18	1,418	1,081	0,521	0,440	0,197	0,088
19	1,363	1,035	0,496	0,418	0,186	0,083

Γ. Ανάλυση ευαισθησίας

Πίνακας Π6-5 : Μεταβολή της σύστασης του υπολείμματος σε σχέση με την %απόκλιση των λόγων ισορροπίας από τους υπολογιζόμενους με την εξίσωση McWilliams. Τα αποτελέσματα αναφέρονται στο παράδειγμα 1.

Μεταβολή των $K_i \rightarrow$ Συστατικά ↓	-10%	-5%	0%	5%	10%
Ισοβουτάνιο	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
κ-Βουτάνιο	0,0113	0,0105	0,0098	0,0092	0,0086
Ισοπεντάνιο	0,5058	0,5063	0,5068	0,5073	0,5077
κ-Πεντάνιο	0,4687	0,4689	0,4692	0,4694	0,4695
κ-Εξάνιο	0,0139	0,0139	0,0139	0,0139	0,0139
κ-Επτάνιο	0,0003	0,0003	0,0003	0,0003	0,0003

Πίνακας Π6-6 : Μεταβολή της σύστασης του αποστάγματος σε σχέση με την %απόκλιση των λόγων ισορροπίας από τους υπολογιζόμενους με την εξίσωση McWilliams. Τα αποτελέσματα αναφέρονται στο παράδειγμα 1.

Μεταβολή των $K_i \rightarrow$ Συστατικά ↓	-10%	-5%	0%	5%	10%
Ισοβουτάνιο	0,0176	0,0176	0,0176	0,0176	0,0176
κ-Βουτάνιο	0,9041	0,9066	0,9089	0,9110	0,9129
Ισοπεντάνιο	0,0600	0,0583	0,0566	0,0552	0,0539
κ-Πεντάνιο	0,0183	0,0175	0,0168	0,0162	0,0156
κ-Εξάνιο	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
κ-Επτάνιο	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000

Πίνακας Π6-7 : Μεταβολή της θερμοκρασίας (K) σε κάθε βαθμίδα σε σχέση με την %απόκλιση των λόγων ισορροπίας από τους υπολογιζόμενους με την εξίσωση McWilliams. Τα αποτελέσματα αναφέρονται στο παράδειγμα 1.

Μεταβολή των $K_i \rightarrow$ Βαθμίδα ↓	-10%	-5%	0%	5%	10%
1	391,1	387,7	384,5	381,6	378,9
2	390,2	386,8	383,7	380,8	378,1
3	389,4	386,1	383,0	380,1	377,5
4	388,6	385,3	382,3	379,4	376,8
5	387,7	384,5	381,5	378,7	376,0
6	386,7	383,5	380,5	377,7	375,2
7	385,6	382,4	379,4	376,7	374,1
8	384,3	381,1	378,2	375,5	372,9

9	382,8	379,7	376,8	374,0	371,5
10	381,2	378,0	375,1	372,4	369,9
11	379,4	376,2	373,3	370,6	368,0
12	377,4	374,2	371,3	368,5	366,0
13	375,2	372,0	369,1	366,3	363,8
14	370,5	367,3	364,3	361,6	359,0
15	365,2	362,0	359,0	356,3	353,8
16	360,0	356,8	353,9	351,2	348,7
17	355,5	352,4	349,6	346,9	344,4
18	352,3	349,2	346,4	343,8	341,4
19	349,9	346,9	344,2	341,6	339,3

Παράδειγμα 2

A. Εκφώνηση

Ζητούνται τα γραμμομοριακά κλάσματα στο απόσταγμα και στο υπόλειμμα και η κατανομή θερμοκρασίας εντός αποστακτικής στήλης που διαχωρίζει μίγμα τροφοδοσίας με γραμμομοριακή παροχή $F=100$ kmoles/h και σύσταση :

Πίνακας Π6-8 : Γραμμομοριακά κλάσματα των συστατικών του μίγματος τροφοδοσίας του παραδείγματος 2.

Συστατικά	z_i
Αιθάνιο	0,1000
Προπυλένιο	0,0600
Προπάνιο	0,1250
Ισοβουτάνιο	0,1250
κ-Βουτάνιο	0,1500
κ-Πεντάνιο	0,1520
κ-Εξάνιο	0,1130
κ-Επτάνιο	0,0900
κ-Οκτάνιο	0,0850

Η τροφοδοσία είναι κορεσμένο υγρό, δηλαδή $q = 1$. Η πίεση λειτουργίας της στήλης είναι 21 atm και ο αριθμός των θεωρητικών βαθμίδων της είναι 12. Οι βαθμίδες κάτω από τη βαθμίδα τροφοδοσίας είναι 8. Η γραμμομοριακή παροχή του αποστάγματος είναι 31,6 kmoles/h και η παροχή της αναρροής είναι 63,2 kmoles/h. Ο αναβραστήρας της αποστακτικής στήλης είναι μερικός και ο συμπυκνωτήρας επίσης μερικός.

B. Αποτελέσματα και σύγκριση

Τα γραμμομοριακά κλάσματα αποστάγματος και υπολείμματος, όπως αυτά προκύπτουν από τα δύο πρότυπα, και οι αντίστοιχες αποκλίσεις φαίνονται στον πίνακα Π6-9 .

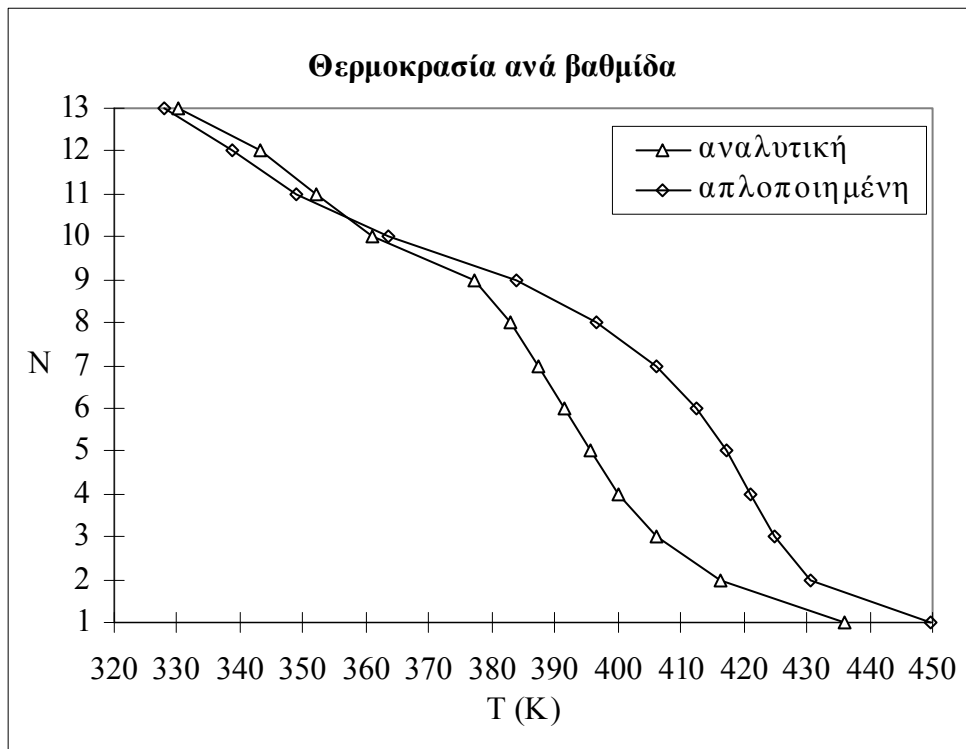
Πίνακας Π6-9 : Γραμμομοριακά κλάσματα υπολείμματος και αποστάγματος με βάση την απλοποιημένη και την αναλυτική μέθοδο και η μεταξύ τους απόκλιση για το παράδειγμα 2.

Συστατικά	$x_{i,B}$ (αγ)	$x_{i,B}$ (απ)	$1000\Delta x_{i,B}$	$x_{i,D}$ (αγ)	$x_{i,D}$ (απ)	$1000\Delta x_{i,D}$
Αιθάνιο	0,0001	0,0000	0,1	0,3162	0,3164	-0,3
Προπυλένιο	0,0060	0,0010	5,1	0,1768	0,1878	-11,0
Προπάνιο	0,0198	0,0022	17,6	0,3527	0,3908	-38,0
Ισοβουτάνιο	0,1388	0,1445	-5,7	0,0951	0,0828	12,3
κ-Βουτάνιο	0,1931	0,2092	-16,1	0,0567	0,0219	34,8
κ-Πεντάνιο	0,2211	0,2221	-1,0	0,0025	0,0003	2,1
κ-Εξάνιο	0,1652	0,1652	0,0	0,0000	0,0000	0,0
κ-Επτάνιο	0,1316	0,1316	0,0	0,0000	0,0000	0,0
κ-Οκτάνιο	0,1243	0,1243	0,0	0,0000	0,0000	0,0
		ΜΕΣ.Α	5,1		ΜΕΣ.Α	10,9
		ΜΕΓ.Α	17,6		ΜΕΓ.Α	38,0

Η κατανομή θερμοκρασίας εντός της αποστακτικής στήλης για κάθε μία από τις δύο προσεγγίσεις και η μεταξύ τους απόκλιση περιγράφεται στον πίνακα Π6-10 και απεικονίζεται στο σχήμα Π6-3.

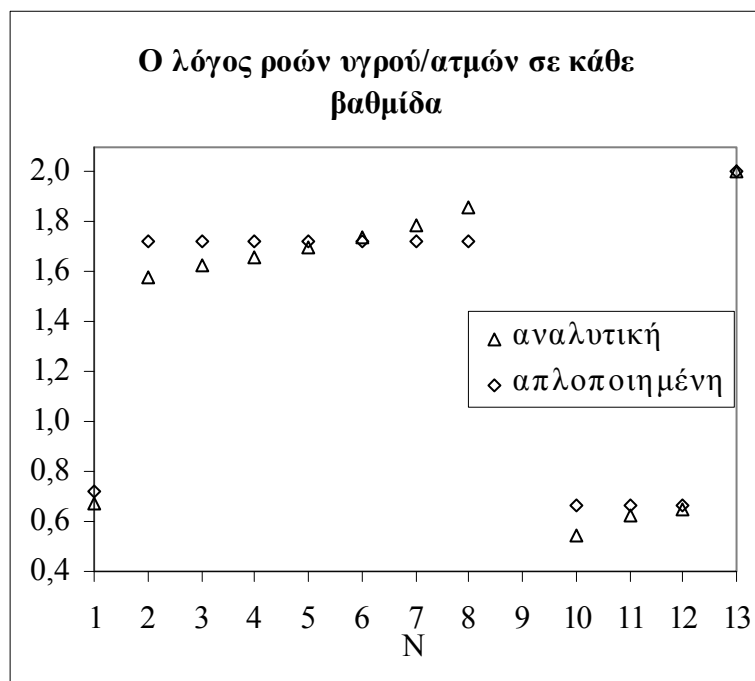
Πίνακας Π6-10 : Θερμοκρασία σε κάθε βαθμίδα της αποστακτικής στήλης με βάση την απλοποιημένη και την αναλυτική μέθοδο και η μεταξύ τους απόκλιση για το παράδειγμα 2.

N	T_i (αγ)(K)	T_i (απ)(K)	$\% \Delta T_i $
1	436,1	449,7	3,1
2	416,2	430,7	3,5
3	406,1	424,8	4,6
4	400,1	421,0	5,2
5	395,7	417,2	5,5
6	391,7	412,5	5,3
7	387,5	406,0	4,8
8	382,9	396,6	3,6
9	377,2	384,0	1,8
10	361,2	363,6	0,7
11	352,2	348,9	0,9
12	343,3	338,7	1,4
13	330,2	328,0	0,7
		ΜΕΣ.Α	3,2
		ΜΕΓ.Α	5,5



Σχήμα Π6-3 : Κατανομή θερμοκρασίας εντός της αποστακτικής στήλης με βάση την απλοποιημένη και την αναλυτική μέθοδο για το παράδειγμα 2.

Ο λόγος των γραμμομοριακών ροών στο τμήμα εξάντλησης και στο τμήμα εμπλουτισμού φαίνεται στο σχήμα Π6-4.



Σχήμα Π6-4 : Μεταβολή του λόγου γραμμομοριακής ροής υγρού προς γραμμομοριακή ροή ατμών εντός της στήλης για το παράδειγμα 2.

Η μεταβολή των λόγων ισορροπίας στο εσωτερικό της στήλης για κάθε συστατικό φαίνεται στον πίνακα Π6-11.

Πίνακας Π6-11 : Μεταβολή των λόγων ισορροπίας με τη θερμοκρασία σε κάθε βαθμίδα για το παράδειγμα 2, όπως αυτή προβλέπεται από τη συσχέτιση McWilliams.

Συστατικά → Βαθμίδα ↓	Αιθά- νιο	Προπυ- λένιο	Προ- πάνιο	Ισο- βου- τάνιο	κ- Βου- τάνιο	κ- Πεντά- νιο	κ- Εξά- νιο	κ- Επτά- νιο	κ- Οκτά- νιο
1	5,940	3,573	3,599	1,939	1,597	0,902	0,551	0,332	0,316
2	5,403	3,145	3,148	1,651	1,338	0,730	0,431	0,252	0,208
3	5,232	3,013	3,009	1,563	1,261	0,680	0,397	0,229	0,181
4	5,124	2,929	2,921	1,509	1,213	0,649	0,376	0,215	0,166
5	5,013	2,845	2,832	1,454	1,164	0,619	0,355	0,202	0,151
6	4,875	2,739	2,722	1,386	1,105	0,581	0,330	0,186	0,135
7	4,682	2,595	2,572	1,295	1,025	0,532	0,298	0,165	0,114
8	4,402	2,388	2,357	1,166	0,914	0,464	0,254	0,138	0,089
9	4,022	2,115	2,075	1,000	0,772	0,379	0,201	0,106	0,063
10	3,407	1,693	1,641	0,755	0,567	0,263	0,131	0,065	0,034
11	2,968	1,406	1,351	0,597	0,438	0,193	0,091	0,043	0,021
12	2,668	1,219	1,162	0,498	0,359	0,153	0,069	0,032	0,014
13	2,360	1,033	0,977	0,404	0,286	0,116	0,050	0,022	0,009

Γ. Ανάλυση ευαισθησίας

Πίνακας Π6-12 : Μεταβολή της σύστασης του υπολείμματος σε σχέση με την %απόκλιση των λόγων ισορροπίας από τους υπολογιζόμενους με την εξίσωση McWilliams. Τα αποτελέσματα αναφέρονται στο παράδειγμα 2.

Μεταβολή των K_i → Συστατικά ↓	-10%	-5%	0%	5%	10%
Αιθάνιο	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Προπυλένιο	0,0012	0,0011	0,0010	0,0009	0,0008
Προπάνιο	0,0027	0,0025	0,0022	0,0020	0,0018
Ισοβουτάνιο	0,1445	0,1445	0,1445	0,1444	0,1444
κ-Βουτάνιο	0,2084	0,2088	0,2092	0,2095	0,2099
κ-Πεντάνιο	0,2220	0,2221	0,2221	0,2221	0,2221
κ-Εξάνιο	0,1652	0,1652	0,1652	0,1652	0,1652
κ-Επτάνιο	0,1316	0,1316	0,1316	0,1316	0,1316
κ-Οκτάνιο	0,1243	0,1243	0,1243	0,1243	0,1243

Πίνακας Π6-13 : Μεταβολή της σύστασης του αποστάγματος σε σχέση με την %απόκλιση των λόγων ισορροπίας από τους υπολογιζόμενους με την εξίσωση McWilliams. Τα αποτελέσματα αναφέρονται στο παράδειγμα 2.

Μεταβολή των $K_i \rightarrow$ Συστατικά ↓	-10%	-5%	0%	5%	10%
Αιθάνιο	0,3164	0,3164	0,3164	0,3164	0,3164
Προπυλένιο	0,1872	0,1875	0,1878	0,1880	0,1882
Προπάνιο	0,3896	0,3902	0,3908	0,3912	0,3916
Ισοβουτάνιο	0,0827	0,0827	0,0828	0,0829	0,0830
κ-Βουτάνιο	0,0236	0,0227	0,0219	0,0211	0,0204
κ-Πεντάνιο	0,0004	0,0004	0,0003	0,0003	0,0003
κ-Εξάνιο	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
κ-Επτάνιο	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
κ-Οκτάνιο	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000

Πίνακας Π6-14 : Μεταβολή της θερμοκρασίας (K) σε κάθε βαθμίδα σε σχέση με την %απόκλιση των λόγων ισορροπίας από τους υπολογιζόμενους με την εξίσωση McWilliams. Τα αποτελέσματα αναφέρονται στο παράδειγμα 2.

Μεταβολή των $K_i \rightarrow$ Βαθμίδα ↓	-10%	-5%	0%	5%	10%
1	460,7	455,0	449,7	444,9	440,4
2	441,3	435,8	430,7	426,0	421,6
3	435,0	429,7	424,8	420,2	416,0
4	431,0	425,8	421,0	416,6	412,5
5	426,9	421,9	417,2	413,0	409,0
6	421,8	417,0	412,5	408,4	404,6
7	414,9	410,3	406,0	402,1	398,4
8	405,2	400,7	396,6	392,8	389,3
9	391,6	387,5	384,0	380,9	378,5
10	369,2	366,0	363,6	362,1	361,6
11	355,9	352,2	348,9	345,8	343,0
12	345,4	341,9	338,7	335,7	332,9
13	334,5	331,1	328,0	325,1	322,4

Παράδειγμα 3

A. Εκφώνηση

Ζητούνται τα γραμμομοριακά κλάσματα στο απόσταγμα και στο υπόλειμμα και η κατανομή θερμοκρασίας εντός αποστακτικής στήλης που διαχωρίζει μίγμα τροφοδοσίας με γραμμομοριακή παροχή $F=100$ kmoles/h και σύσταση :

Πίνακας Π6-15 : Γραμμομοριακά κλάσματα των συστατικών του μίγματος τροφοδοσίας του παραδείγματος 3.

Συστατικά	z_i
Προπάνιο	0,3000
κ-Βουτάνιο	0,3000
κ-Πεντάνιο	0,4000

Η τροφοδοσία είναι κορεσμένοι ατμοί, δηλαδή $q = 0$. Η πίεση λειτουργίας της στήλης είναι 11 atm και ο αριθμός των θεωρητικών βαθμίδων της είναι 6. Οι βαθμίδες κάτω από τη βαθμίδα τροφοδοσίας είναι 2. Η γραμμομοριακή παροχή του αποστάγματος είναι 50 kmoles/h και η παροχή της αναρροής είναι 100 kmoles/h. Ο αναβραστήρας της αποστακτικής στήλης είναι μερικός και ο συμπυκνωτήρας ολικός.

Β. Αποτελέσματα και σύγκριση

Τα γραμμομοριακά κλάσματα αποστάγματος και υπολείμματος, όπως αυτά προκύπτουν από τα δύο πρότυπα, και οι αντίστοιχες αποκλίσεις φαίνονται στον πίνακα Π6-16.

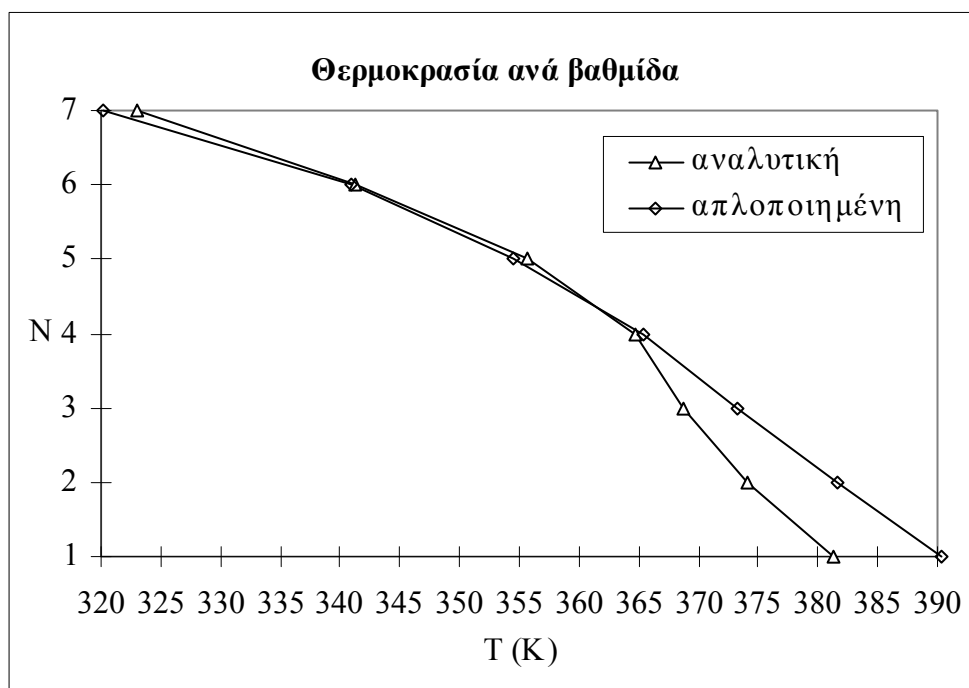
Πίνακας Π6-16 : Γραμμομοριακά κλάσματα υπολείμματος και αποστάγματος με βάση την απλοποιημένη και την αναλυτική μέθοδο και η μεταξύ τους απόκλιση για το παράδειγμα 3.

Συστατικά	$x_{i,B}$ (αν)	$x_{i,B}$ (απ)	$1000\Delta x_{i,B}$	$x_{i,D}$ (αν)	$x_{i,D}$ (απ)	$1000\Delta x_{i,D}$
Προπάνιο	0,0314	0,0201	11,3	0,5686	0,5799	-11,3
κ-Βουτάνιο	0,2567	0,2346	22,1	0,3433	0,3654	-22,1
κ-Πεντάνιο	0,7118	0,7453	-33,4	0,0882	0,0547	33,4
		ΜΕΣ.Α	22,3		ΜΕΣ.Α	22,3
		ΜΕΓ.Α	33,4		ΜΕΓ.Α	33,4

Η κατανομή θερμοκρασίας εντός της αποστακτικής στήλης για κάθε μία από τις δύο προσεγγίσεις και η μεταξύ τους απόκλιση περιγράφεται στον πίνακα Π6-17 και απεικονίζεται στο σχήμα Π6-5.

Πίνακας Π6-17 : Θερμοκρασία σε κάθε βαθμίδα της αποστακτικής στήλης με βάση την απλοποιημένη και την αναλυτική μέθοδο και η μεταξύ τους απόκλιση για το παράδειγμα 3.

N	T_i (αν)(K)	T_i (απ)(K)	$\% \Delta T_i $
1	381,3	390,3	2,4
2	374,0	381,6	2,0
3	368,8	373,3	1,2
4	364,8	365,4	0,2
5	355,6	354,5	0,3
6	341,3	341,0	0,1
7	322,9	320,2	0,8
		ΜΕΣ.Α	1,0



Σχήμα Π6-5 : Κατανομή θερμοκρασίας εντός της αποστακτικής στήλης με βάση την απλοποιημένη και την αναλυτική μέθοδο για το παράδειγμα 3.

Ο λόγος των γραμμομοριακών ροών στο τμήμα εξάντλησης και στο τμήμα εμπλουτισμού φαίνεται στο σχήμα Π6-6.



Σχήμα Π6-6 : Μεταβολή του λόγου γραμμομοριακής ροής υγρού προς γραμμομοριακή ροή ατμών εντός της στήλης για το παράδειγμα 3.

Η μεταβολή των λόγων ισορροπίας στο εσωτερικό της στήλης για κάθε συστατικό φαίνεται στον πίνακα Π6-18.

Πίνακας Π6-18 : Μεταβολή των λόγων ισορροπίας με τη θερμοκρασία σε κάθε βαθμίδα για το παράδειγμα 3, όπως αυτή προβλέπεται από τη συσχέτιση McWilliams.

Συστατικό→ βαθμίδα ↓	Προπάνιο	κ-Βουτάνιο	κ-Πεντάνιο
1	3,715	1,569	0,748
2	3,393	1,392	0,648
3	3,092	1,231	0,560
4	2,816	1,088	0,484
5	2,446	0,904	0,388
6	2,017	0,701	0,286
7	1,429	0,445	0,167

Γ. Ανάλυση ευαισθησίας

Πίνακας Π6-19 : Μεταβολή της σύστασης του υπολείμματος σε σχέση με την %απόκλιση των λόγων ισορροπίας από τους υπολογιζόμενους με την εξίσωση McWilliams. Τα αποτελέσματα αναφέρονται στο παράδειγμα 3.

Μεταβολή των K_i → Συστατικά ↓	-10%	-5%	0%	5%	10%
Προπάνιο	0,0220	0,0210	0,0201	0,0193	0,0186
κ-Βουτάνιο	0,2366	0,2356	0,2346	0,2337	0,2328
κ-Πεντάνιο	0,7414	0,7434	0,7453	0,7470	0,7486

Πίνακας Π6-20 : Μεταβολή της σύστασης του αποστάγματος σε σχέση με την %απόκλιση των λόγων ισορροπίας από τους υπολογιζόμενους με την εξίσωση McWilliams. Τα αποτελέσματα αναφέρονται στο παράδειγμα 3.

Μεταβολή των K_i → Συστατικά ↓	-10%	-5%	0%	5%	10%
Προπάνιο	0,5780	0,5790	0,5799	0,5807	0,5814
κ-Βουτάνιο	0,3634	0,3644	0,3654	0,3663	0,3672
κ-Πεντάνιο	0,0586	0,0566	0,0547	0,0530	0,0514

Πίνακας Π6-21 : Μεταβολή της θερμοκρασίας (K) σε κάθε βαθμίδα σε σχέση με την %απόκλιση των λόγων ισορροπίας από τους υπολογιζόμενους με την εξίσωση McWilliams. Τα αποτελέσματα αναφέρονται στο παράδειγμα 3.

Μεταβολή των $K_i \rightarrow$ Βαθμίδα ↓	-10%	-5%	0%	5%	10%
1	397,3	393,7	390,3	387,2	384,3
2	388,4	384,9	381,6	378,6	375,8
3	380,0	376,5	373,3	370,3	367,6
4	372,1	368,6	365,4	362,5	359,7
5	360,9	357,6	354,5	351,6	349,0
6	347,1	343,9	341,0	338,2	335,7
7	326,0	323,0	320,2	317,6	315,3

Παράδειγμα 4

A. Εκφώνηση

Ζητούνται τα γραμμομοριακά κλάσματα στο απόσταγμα και στο υπόλειμμα και η κατανομή θερμοκρασίας εντός αποστακτικής στήλης που διαχωρίζει μίγμα τροφοδοσίας με γραμμομοριακή παροχή $F=100$ kmoles/h και σύσταση :

Πίνακας Π6-22 : Γραμμομοριακά κλάσματα των συστατικών του μίγματος τροφοδοσίας του παραδείγματος 4.

Συστατικά	z_i
Προπάνιο	0,4000
κ-Βουτάνιο	0,4000
Ισοπεντάνιο	0,1000
κ-Πεντάνιο	0,1000

Η τροφοδοσία είναι κορεσμένο υγρό, δηλαδή $q = 1$. Η πίεση λειτουργίας της στήλης είναι 14 atm και ο αριθμός των θεωρητικών βαθμίδων της είναι 10. Οι βαθμίδες κάτω από τη βαθμίδα τροφοδοσίας είναι 6. Η γραμμομοριακή παροχή του αποστάγματος είναι 40 kmoles/h και η παροχή της αναρροής είναι 200 kmoles/h. Ο αναβραστήρας της αποστακτικής στήλης είναι μερικός και ο συμπυκνωτήρας ολικός.

B. Αποτελέσματα και σύγκριση

Τα γραμμομοριακά κλάσματα αποστάγματος και υπολείμματος, όπως αυτά προκύπτουν από τα δύο πρότυπα, και οι αντίστοιχες αποκλίσεις φαίνονται στον πίνακα Π6-23.

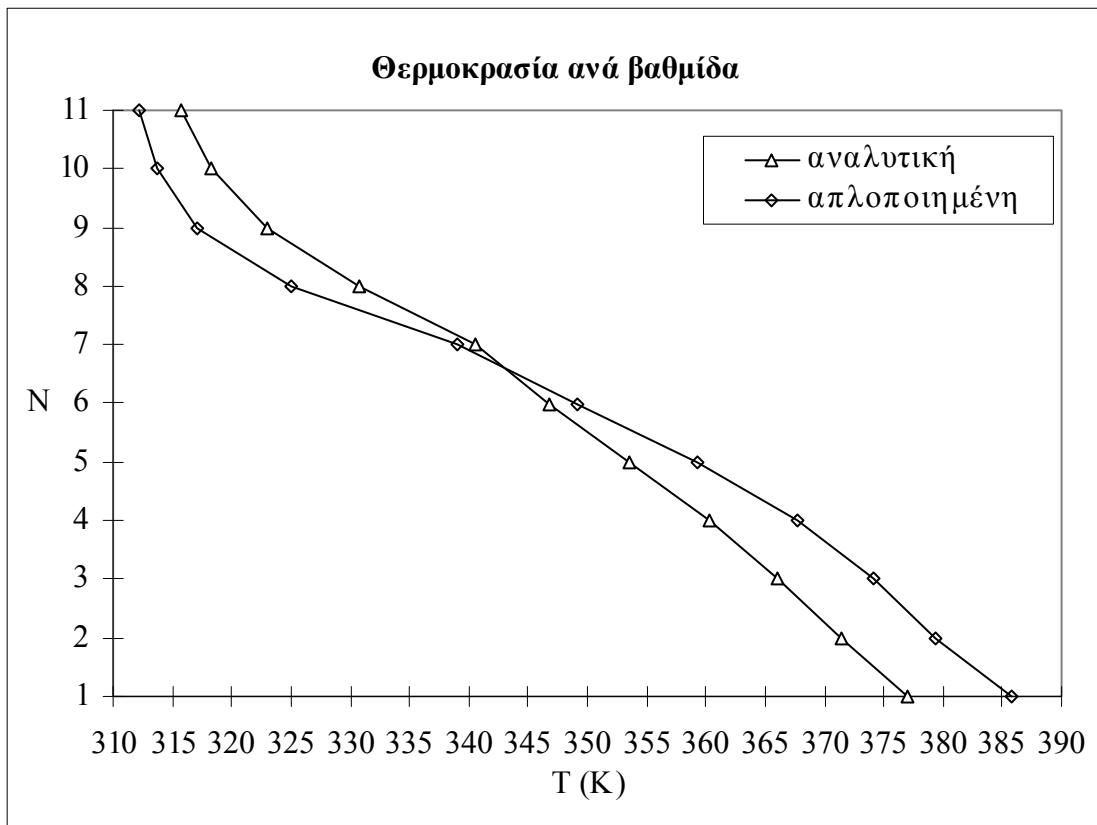
Πίνακας Π6-23 : Γραμμομοριακά κλάσματα υπολείμματος και αποστάγματος με βάση την απλοποιημένη και την αναλυτική μέθοδο και η μεταξύ τους απόκλιση για το παράδειγμα 4.

Συστατικά	x_{i,B} (αν)	x_{i,B} (απ)	1000Δ x_{i,B}	x_{i,D} (αν)	x_{i,D} (απ)	1000Δ x_{i,D}
Προπάνιο	0,0300	0,0115	18,6	0,9549	0,9828	-27,8
κ-Βουτάνιο	0,6372	0,6553	-18,1	0,0442	0,0171	27,1
Ισοπεντάνιο	0,1663	0,1666	-0,3	0,0005	0,0001	0,4
κ-Πεντάνιο	0,1664	0,1666	-0,2	0,0004	0,0001	0,3
		ΜΕΣ.Α	9,3		ΜΕΣ.Α	13,9
		ΜΕΓ.Α	18,6		ΜΕΓ.Α	27,8

Η κατανομή θερμοκρασίας εντός της αποστακτικής στήλης για κάθε μία από τις δύο προσεγγίσεις και η μεταξύ τους απόκλιση περιγράφεται στον πίνακα Π6-24 και απεικονίζεται στο σχήμα Π6-7.

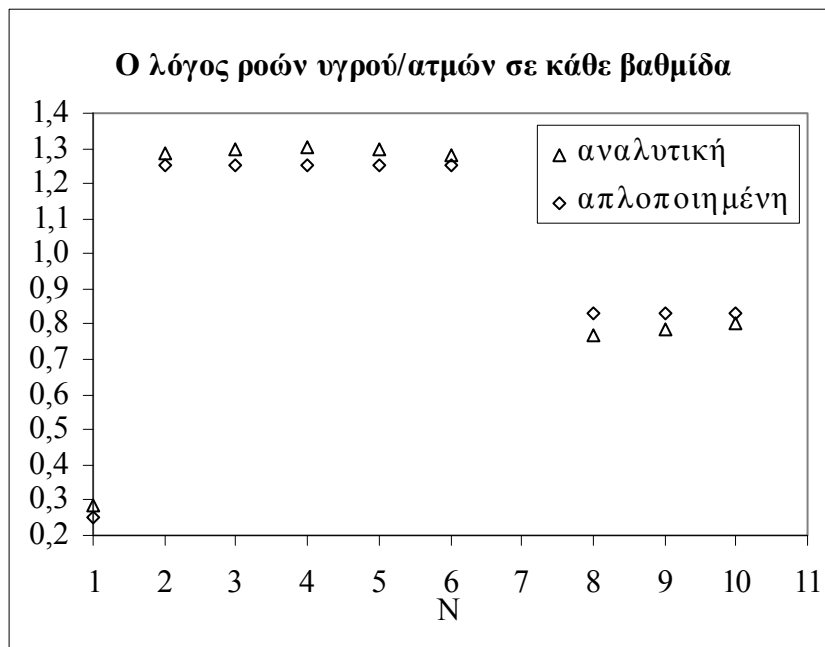
Πίνακας Π6-24 : Θερμοκρασία σε κάθε βαθμίδα της αποστακτικής στήλης με βάση την απλοποιημένη και την αναλυτική μέθοδο και η μεταξύ τους απόκλιση για το παράδειγμα 4.

N	T_i (αν)(K)	T_i (απ)(K)	% ΔT_i
1	377,0	385,7	2,3
2	371,4	379,4	2,1
3	366,1	374,1	2,2
4	360,2	367,7	2,1
5	353,6	359,3	1,6
6	346,8	349,2	0,7
7	340,6	339,0	0,5
8	330,7	325,0	1,7
9	323,1	317,2	1,8
10	318,3	313,8	1,4
11	315,7	312,2	1,1
		ΜΕΣ.Α	1,6
		ΜΕΓ.Α	2,3



Σχήμα Π6-7 : Κατανομή θερμοκρασίας εντός της αποστακτικής στήλης με βάση την απλοποιημένη και την αναλυτική μέθοδο για το παράδειγμα 4.

Ο λόγος των γραμμομοριακών ροών στο τμήμα εξάντλησης και στο τμήμα εμπλουτισμού φαίνεται στο σχήμα Π6-8.



Σχήμα Π6-8 : Μεταβολή του λόγου γραμμομοριακής ροής υγρού προς γραμμομοριακή ροή ατμών εντός της στήλης για το παράδειγμα 4.

Η μεταβολή των λόγων ισορροπίας στο εσωτερικό της στήλης για κάθε συστατικό φαίνεται στον πίνακα Π6-25.

Πίνακας Π6-25 : Μεταβολή των λόγων ισορροπίας με τη θερμοκρασία σε κάθε βαθμίδα για το παράδειγμα 4, όπως αυτή προβλέπεται από τη συσχέτιση McWilliams.

Συστατικά → Βαθμίδα ↓	Προπάνιο	κ-Βουτάνιο	Ισοπεντάνιο	κ-Πεντάνιο
1	2,921	1,171	0,636	0,561
2	2,730	1,070	0,573	0,504
3	2,572	0,990	0,523	0,459
4	2,386	0,896	0,467	0,408
5	2,148	0,780	0,398	0,346
6	1,876	0,653	0,323	0,280
7	1,614	0,535	0,257	0,221
8	1,284	0,396	0,181	0,154
9	1,113	0,328	0,146	0,123
10	1,043	0,301	0,132	0,111
11	1,012	0,289	0,126	0,106

Γ. Ανάλυση ευαισθησίας

Πίνακας Π6-26 : Μεταβολή της σύστασης του υπολείμματος σε σχέση με την %απόκλιση των λόγων ισορροπίας από τους υπολογιζόμενους με την εξίσωση McWilliams. Τα αποτελέσματα αναφέρονται στο παράδειγμα 4.

Μεταβολή των K_i → Συστατικά ↓	-10%	-5%	0%	5%	10%
Προπάνιο	0,0130	0,0122	0,0115	0,0109	0,0103
κ-Βουτάνιο	0,6538	0,6546	0,6553	0,6559	0,6565
Ισοπεντάνιο	0,1666	0,1666	0,1666	0,1666	0,1666
κ-Πεντάνιο	0,1666	0,1666	0,1666	0,1666	0,1666

Πίνακας Π6-27 : Μεταβολή της σύστασης του αποστάγματος σε σχέση με την %απόκλιση των λόγων ισορροπίας από τους υπολογιζόμενους με την εξίσωση McWilliams. Τα αποτελέσματα αναφέρονται στο παράδειγμα 4.

Μεταβολή των K_i → Συστατικά ↓	-10%	-5%	0%	5%	10%
Προπάνιο	0,9806	0,9817	0,9828	0,9837	0,9846
κ-Βουτάνιο	0,0192	0,0181	0,0171	0,0161	0,0153

Ισοπεντάνιο	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001
κ-Πεντάνιο	0,0001	0,0001	0,0001	0,0000	0,0000

Πίνακας Π6-28 : Μεταβολή της θερμοκρασίας (K) σε κάθε βαθμίδα σε σχέση με την %απόκλιση των λόγων ισορροπίας από τους υπολογιζόμενους με την εξίσωση McWilliams. Τα αποτελέσματα αναφέρονται στο παράδειγμα 4.

Μεταβολή των $K_i \rightarrow$ Βαθμίδα ↓	-10%	-5%	0%	5%	10%
1	393,2	389,3	385,7	382,4	379,3
2	386,6	382,9	379,4	376,2	373,2
3	381,0	377,4	374,1	371,0	368,2
4	374,3	370,9	367,7	364,8	362,0
5	365,8	362,4	359,3	356,4	353,7
6	355,7	352,3	349,2	346,4	343,7
7	345,5	342,1	339,0	336,1	333,4
8	331,4	328,1	325,0	322,2	319,6
9	323,2	320,0	317,2	314,5	312,0
10	319,5	316,5	313,8	311,2	308,8
11	317,8	314,9	312,2	309,8	307,4

Παράδειγμα 5

A. Εκφώνηση

Ζητούνται τα γραμμομοριακά κλάσματα στο απόσταγμα και στο υπόλειμμα και η κατανομή θερμοκρασίας εντός αποστακτικής στήλης που διαχωρίζει μίγμα τροφοδοσίας με γραμμομοριακή παροχή $F=100$ kmoles/h και σύσταση :

Πίνακας Π6-29 : Γραμμομοριακά κλάσματα των συστατικών του μίγματος τροφοδοσίας του παραδείγματος 5.

Συστατικά	z_i
Αιθάνιο	0,0600
Προπάνιο	0,1200
Ισοβουτάνιο	0,1100
κ-Βουτάνιο	0,2200
Ισοπεντάνιο	0,0600
κ-Πεντάνιο	0,1800
κ-Εξάνιο	0,2500

Η τροφοδοσία είναι κορεσμένοι ατμοί, δηλαδή $q = 0$. Η πίεση λειτουργίας της στήλης είναι 10,2 atm και ο αριθμός των θεωρητικών βαθμίδων της είναι 10. Οι βαθμίδες κάτω από τη βαθμίδα τροφοδοσίας είναι 5. Η γραμμομοριακή παροχή του αποστάγματος είναι 54,07

kmol/h και η παροχή της αναρροής είναι 103,43 kmol/h. Ο αναβραστήρας της αποστακτικής στήλης είναι μερικός και ο συμπυκνωτήρας ολικός.

Β. Αποτελέσματα και σύγκριση

Τα γραμμομοριακά κλάσματα αποστάγματος και υπολείμματος, όπως αυτά προκύπτουν από τα δύο πρότυπα, και οι αντίστοιχες αποκλίσεις φαίνονται στον πίνακα Π6-30.

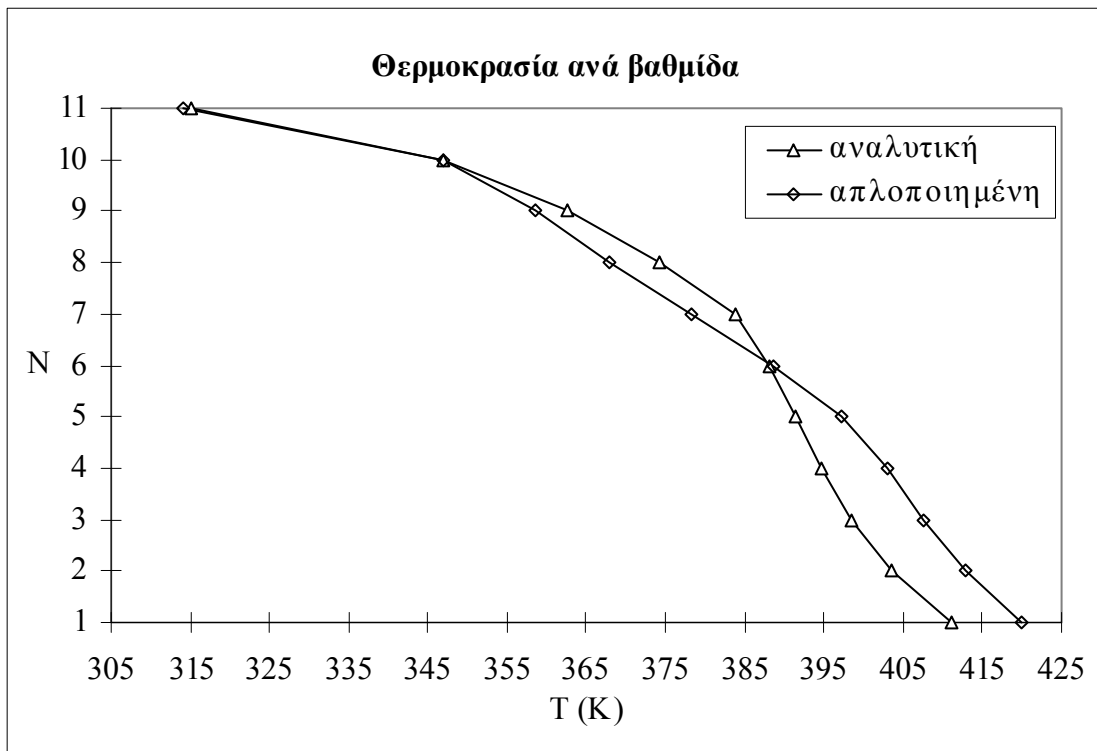
Πίνακας Π6-30 : Γραμμομοριακά κλάσματα υπολείμματος και αποστάγματος με βάση την απλοποιημένη και την αναλυτική μέθοδο και η μεταξύ τους απόκλιση για το παράδειγμα 5.

Συστατικά	$x_{i,B}$ (αυ)	$x_{i,B}$ (απ)	$1000\Delta x_{i,B}$	$x_{i,D}$ (αυ)	$x_{i,D}$ (απ)	$1000\Delta x_{i,D}$
Αιθάνιο	0,0000	0,0000	0,0	0,1110	0,1110	0,0
Προπάνιο	0,0006	0,0002	0,4	0,2214	0,2218	-0,3
Ισοβουτάνιο	0,0139	0,0063	7,6	0,1916	0,1981	-6,4
κ-Βουτάνιο	0,0652	0,0393	25,9	0,3515	0,3735	-22,0
Ισοπεντάνιο	0,0846	0,0907	-6,0	0,0391	0,0339	5,1
κ-Πεντάνιο	0,2985	0,3226	-24,1	0,0794	0,0589	20,5
κ-Εξάνιο	0,5373	0,5410	-3,7	0,0059	0,0028	3,1
		ΜΕΣ.Α	9,7		ΜΕΣ.Α	8,2
		ΜΕΓ.Α	25,9		ΜΕΓ.Α	22,0

Η κατανομή θερμοκρασίας εντός της αποστακτικής στήλης για κάθε μία από τις δύο προσεγγίσεις και η μεταξύ τους απόκλιση περιγράφεται στον πίνακα Π6-31 και απεικονίζεται στο σχήμα Π6-9.

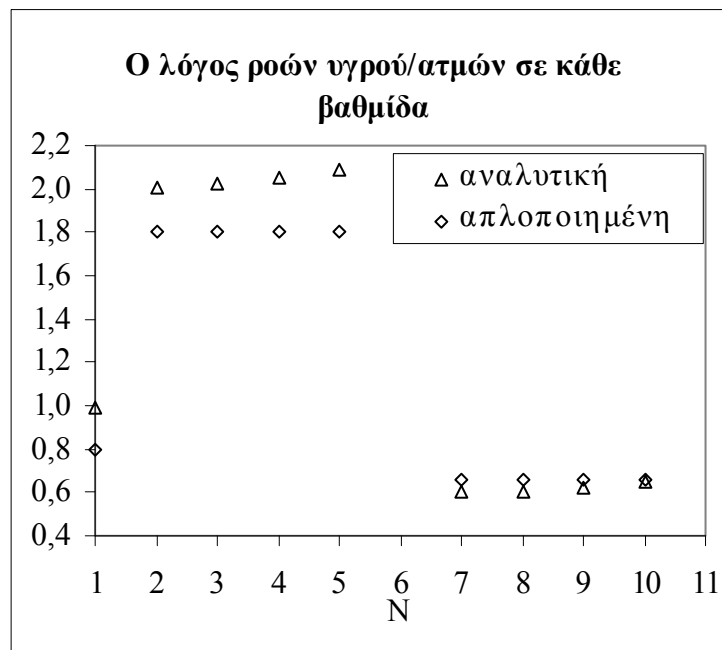
Πίνακας Π6-31 : Θερμοκρασία σε κάθε βαθμίδα της αποστακτικής στήλης με βάση την απλοποιημένη και την αναλυτική μέθοδο και η μεταξύ τους απόκλιση για το παράδειγμα 5.

N	T_i (αυ)(K)	T_i (απ)(K)	$\% \Delta T_i $
1	411,1	420,0	2,2
2	403,6	412,8	2,3
3	398,5	407,7	2,3
4	394,6	403,0	2,1
5	391,4	397,3	1,5
6	388,2	388,5	0,1
7	383,9	378,1	1,5
8	374,2	367,9	1,7
9	362,6	358,5	1,1
10	347,0	347,0	0,0
11	315,1	314,2	0,3
		ΜΕΣ.Α	1,4
		ΜΕΓ.Α	2,3



Σχήμα Π6-9 : Κατανομή θερμοκρασίας εντός της αποστακτικής στήλης με βάση την απλοποιημένη και την αναλυτική μέθοδο για το παράδειγμα 5.

Ο λόγος των γραμμομοριακών ροών στο τμήμα εξάντλησης και στο τμήμα εμπλουτισμού φαίνεται στο σχήμα Π6-10.



Σχήμα Π6-10 : Μεταβολή του λόγου γραμμομοριακής ροής υγρού προς γραμμομοριακή ροή ατμών εντός της στήλης για το παράδειγμα 5.

Η μεταβολή των λόγων ισορροπίας στο εσωτερικό της στήλης για κάθε συστατικό φαίνεται στον πίνακα Π6-32.

Πίνακας Π6-32 : Μεταβολή των λόγων ισορροπίας με τη θερμοκρασία σε κάθε βαθμίδα για το παράδειγμα 5, όπως αυτή προβλέπεται από τη συσχέτιση McWilliams.

Συστατικά → Βαθμίδα ↓	Αιθάνιο	Προπάνιο	Ισο- βουτάνιο	κ- Βουτάνιο	Ισο- πεντάνιο	κ- Πεντάνιο	κ- Εξάνιο
1	9,656	5,163	2,902	2,403	1,379	1,218	0,681
2	9,253	4,862	2,699	2,219	1,258	1,108	0,610
3	8,967	4,651	2,559	2,093	1,175	1,034	0,562
4	8,701	4,457	2,431	1,979	1,101	0,967	0,520
5	8,379	4,226	2,281	1,845	1,015	0,889	0,472
6	7,881	3,875	2,055	1,645	0,890	0,776	0,402
7	7,289	3,471	1,800	1,423	0,752	0,653	0,329
8	6,701	3,082	1,561	1,217	0,627	0,542	0,265
9	6,168	2,742	1,356	1,042	0,525	0,451	0,213
10	5,516	2,342	1,122	0,847	0,412	0,352	0,160
11	3,745	1,355	0,581	0,411	0,179	0,149	0,059

Γ. Ανάλυση ευαισθησίας

Πίνακας Π6-33 : Μεταβολή της σύστασης του υπολείμματος σε σχέση με την %απόκλιση των λόγων ισορροπίας από τους υπολογιζόμενους με την εξίσωση McWilliams. Τα αποτελέσματα αναφέρονται στο παράδειγμα 5.

Μεταβολή των K_i → Συστατικά ↓	-10%	-5%	0%	5%	10%
Αιθάνιο	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Προπάνιο	0,0003	0,0002	0,0002	0,0002	0,0002
Ισοβουτάνιο	0,0072	0,0067	0,0063	0,0059	0,0056
κ-Βουτάνιο	0,0422	0,0407	0,0393	0,0379	0,0367
Ισοπεντάνιο	0,0900	0,0903	0,0907	0,0910	0,0913
κ-Πεντάνιο	0,3199	0,3213	0,3226	0,3238	0,3249
κ-Εξάνιο	0,5404	0,5407	0,5410	0,5412	0,5414

Πίνακας Π6-34 : Μεταβολή της σύστασης του αποστάγματος σε σχέση με την %απόκλιση των λόγων ισορροπίας από τους υπολογιζόμενους με την εξίσωση McWilliams. Τα αποτελέσματα αναφέρονται στο παράδειγμα 5.

Μεταβολή των K_i → Συστατικά ↓	-10%	-5%	0%	5%	10%
Αιθάνιο	0,1110	0,1110	0,1110	0,1110	0,1110

Προπάνιο	0,2217	0,2217	0,2218	0,2218	0,2218
Ισοβουτάνιο	0,1973	0,1977	0,1981	0,1984	0,1987
κ-Βουτάνιο	0,3710	0,3723	0,3735	0,3747	0,3757
Ισοπεντάνιο	0,0345	0,0342	0,0339	0,0337	0,0334
κ-Πεντάνιο	0,0611	0,0600	0,0589	0,0579	0,0569
κ-Εξάνιο	0,0033	0,0031	0,0028	0,0026	0,0024

Πίνακας Π6-35 : Μεταβολή της θερμοκρασίας (K) σε κάθε βαθμίδα σε σχέση με την %απόκλιση των λόγων ισορροπίας από τους υπολογιζόμενους με την εξίσωση McWilliams. Τα αποτελέσματα αναφέρονται στο παράδειγμα 5.

Μεταβολή των $K_i \rightarrow$ Βαθμίδα ↓	-10%	-5%	0%	5%	10%
1	427,9	423,8	420,0	416,6	413,3
2	420,3	416,4	412,8	409,4	406,3
3	415,0	411,2	407,7	404,4	401,4
4	410,1	406,4	403,0	399,8	396,8
5	404,3	400,6	397,3	394,1	391,2
6	395,5	391,9	388,5	385,4	382,5
7	385,1	381,5	378,1	375,1	372,2
8	374,6	371,1	367,9	364,9	362,1
9	364,9	361,6	358,5	355,6	353,0
10	353,0	349,9	347,0	344,3	341,7
11	320,0	317,0	314,2	311,5	309,1

Παράδειγμα 6

A. Εκφώνηση

Ζητούνται τα γραμμομοριακά κλάσματα στο απόσταγμα και στο υπόλειμμα και η κατανομή θερμοκρασίας εντός αποστακτικής στήλης που διαχωρίζει μίγμα τροφοδοσίας με γραμμομοριακή παροχή $F=100$ kmoles/h και σύσταση :

Πίνακας Π6-36 : Γραμμομοριακά κλάσματα των συστατικών του μίγματος τροφοδοσίας του παραδείγματος 6.

Συστατικά	z_i
Ισοβουτάνιο	0,0600
κ-Βουτάνιο	0,1700
Ισοπεντάνιο	0,3200
κ-Πεντάνιο	0,4500

Η τροφοδοσία είναι κορεσμένο υγρό, δηλαδή $q = 1$. Η πίεση λειτουργίας της στήλης είναι 6,8 atm και ο αριθμός των θεωρητικών βαθμίδων της είναι 17. Οι βαθμίδες κάτω από τη βαθμίδα τροφοδοσίας είναι 6. Η γραμμομοριακή παροχή του αποστάγματος είναι 24

kmol/h και η παροχή της αναρροής είναι 88,8 kmol/h. Ο αναβραστήρας της αποστακτικής στήλης είναι μερικός και ο συμπυκνωτήρας ολικός.

Β. Αποτελέσματα και σύγκριση

Τα γραμμομοριακά κλάσματα αποστάγματος και υπολείμματος, όπως αυτά προκύπτουν από τα δύο πρότυπα, και οι αντίστοιχες αποκλίσεις φαίνονται στον πίνακα Π6-37.

Πίνακας Π6-37 : Γραμμομοριακά κλάσματα υπολείμματος και αποστάγματος με βάση την απλοποιημένη και την αναλυτική μέθοδο και η μεταξύ τους απόκλιση για το παράδειγμα 6.

Συστατικά	$x_{i,B}$ (αν)	$x_{i,B}$ (απ)	$1000\Delta x_{i,B}$	$x_{i,D}$ (αν)	$x_{i,D}$ (απ)	$1000\Delta x_{i,D}$
Ισοβουτάνιο	0,0046	0,0018	2,9	0,2353	0,2443	-9,0
κ-Βουτάνιο	0,0303	0,0207	9,6	0,6124	0,6428	-30,4
Ισοπεντάνιο	0,3847	0,3931	-8,4	0,1151	0,0886	26,6
κ-Πεντάνιο	0,5804	0,5844	-4,1	0,0372	0,0243	12,9
		ΜΕΣ.Α	6,2		ΜΕΣ.Α	19,7
		ΜΕΓ.Α	9,6		ΜΕΓ.Α	30,4

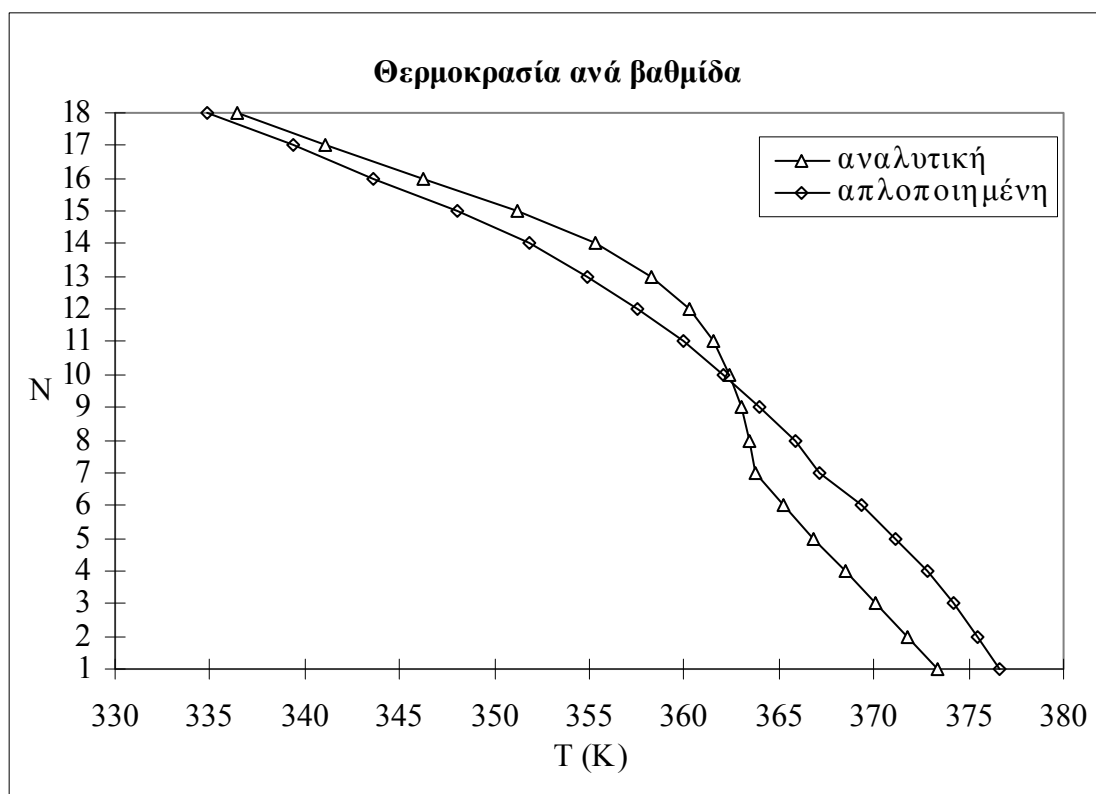
Η κατανομή θερμοκρασίας εντός της αποστακτικής στήλης για κάθε μία από τις δύο προσεγγίσεις και η μεταξύ τους απόκλιση περιγράφεται στον πίνακα Π6-38 και απεικονίζεται στο σχήμα Π6-11.

]

Πίνακας Π6-38 : Θερμοκρασία σε κάθε βαθμίδα της αποστακτικής στήλης με βάση την απλοποιημένη και την αναλυτική μέθοδο και η μεταξύ τους απόκλιση για το παράδειγμα 6.

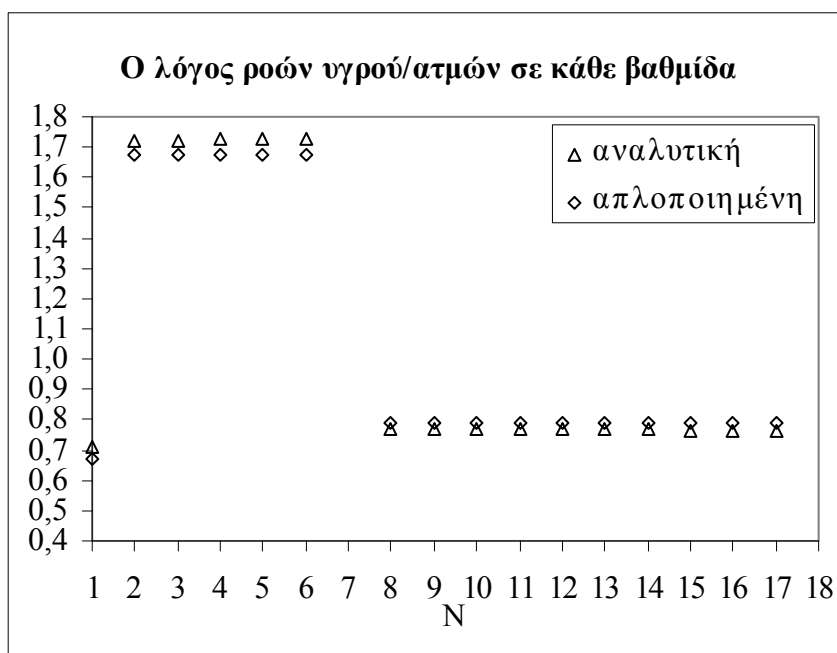
N	T_i (αν)(K)	T_i (απ)(K)	$\% \Delta T_i$
1	373,3	376,6	0,9
2	371,7	375,4	1,0
3	370,1	374,2	1,1
4	368,5	372,8	1,2
5	366,8	371,2	1,2
6	365,2	369,3	1,1
7	363,8	367,1	0,9
8	363,4	365,9	0,7
9	363,0	364,0	0,3
10	362,4	362,0	0,1
11	361,5	359,9	0,5
12	360,2	357,6	0,7
13	358,3	354,9	0,9
14	355,3	351,8	1,0
15	351,2	348,1	0,9
16	346,3	343,6	0,8
17	341,1	339,4	0,5
18	336,4	334,8	0,5

ΜΕΣ.Α	0,8
ΜΕΓ.Α	1,2



Σχήμα Π6-11 : Κατανομή θερμοκρασίας εντός της αποστακτικής στήλης με βάση την απλοποιημένη και την αναλυτική μέθοδο για το παράδειγμα 6.

Ο λόγος των γραμμομοριακών ροών στο τμήμα εξάντλησης και στο τμήμα εμπλουτισμού φαίνεται στο σχήμα Π6-12.



Σχήμα Π6-12 : Μεταβολή του λόγου γραμμομοριακής ροής υγρού προς γραμμομοριακή ροή ατμών εντός της στήλης για το παράδειγμα 6.

Η μεταβολή των λόγων ισορροπίας στο εσωτερικό της στήλης για κάθε συστατικό φαίνεται στον πίνακα Π6-39.

Πίνακας Π6-39 : Μεταβολή των λόγων ισορροπίας με τη θερμοκρασία σε κάθε βαθμίδα για το παράδειγμα 6, όπως αυτή προβλέπεται από τη συσχέτιση McWilliams.

Συστατικά → Βαθμίδα ↓	Ισοβουτάνιο	κ-Βουτάνιο	Ισοπεντάνιο	κ-Πεντάνιο
1	2,562	2,056	1,068	0,912
2	2,523	2,021	1,047	0,893
3	2,480	1,984	1,025	0,874
4	2,432	1,942	1,000	0,852
5	2,378	1,894	0,972	0,827
6	2,316	1,840	0,939	0,799
7	2,244	1,777	0,903	0,767
8	2,203	1,742	0,882	0,748
9	2,144	1,690	0,852	0,722
10	2,081	1,636	0,820	0,695
11	2,014	1,579	0,787	0,666
12	1,942	1,516	0,751	0,635
13	1,861	1,448	0,712	0,601
14	1,769	1,370	0,668	0,562
15	1,662	1,278	0,616	0,518
16	1,538	1,174	0,559	0,468
17	1,423	1,079	0,506	0,423
18	1,307	0,982	0,454	0,378

Γ. Ανάλυση ευαισθησίας

Πίνακας Π6-40 : Μεταβολή της σύστασης του υπολείμματος σε σχέση με την %απόκλιση των λόγων ισορροπίας από τους υπολογιζόμενους με την εξίσωση McWilliams. Τα αποτελέσματα αναφέρονται στο παράδειγμα 6.

Μεταβολή των K_i → Συστατικά ↓	-10%	-5%	0%	5%	10%
Ισοβουτάνιο	0,0021	0,0019	0,0018	0,0017	0,0016
κ-Βουτάνιο	0,0226	0,0216	0,0207	0,0198	0,0191
Ισοπεντάνιο	0,3917	0,3924	0,3931	0,3937	0,3943
κ-Πεντάνιο	0,5836	0,5841	0,5844	0,5848	0,5851

Πίνακας Π6-41 : Μεταβολή της σύστασης του αποστάγματος σε σχέση με την %απόκλιση των λόγων ισορροπίας από τους υπολογιζόμενους με την εξίσωση McWilliams. Τα αποτελέσματα αναφέρονται στο παράδειγμα 6.

Μεταβολή των $K_i \rightarrow$ Συστατικά ↓	-10%	-5%	0%	5%	10%
Ισοβουτάνιο	0,2434	0,2439	0,2443	0,2447	0,2451
κ-Βουτάνιο	0,6367	0,6399	0,6428	0,6455	0,6480
Ισοπεντάνιο	0,0930	0,0907	0,0886	0,0866	0,0847
κ-Πεντάνιο	0,0269	0,0255	0,0243	0,0232	0,0222

Πίνακας Π6-42 : Μεταβολή της θερμοκρασίας (K) σε κάθε βαθμίδα σε σχέση με την %απόκλιση των λόγων ισορροπίας από τους υπολογιζόμενους με την εξίσωση McWilliams. Τα αποτελέσματα αναφέρονται στο παράδειγμα 6.

Μεταβολή των $K_i \rightarrow$ Βαθμίδα ↓	-10%	-5%	0%	5%	10%
1	382,7	379,5	376,6	373,9	371,3
2	381,5	378,3	375,4	372,7	370,2
3	380,1	377,0	374,2	371,5	369,0
4	378,7	375,6	372,8	370,1	367,7
5	377,0	374,0	371,2	368,6	366,1
6	375,1	372,1	369,3	366,7	364,2
7	373,0	369,9	367,1	364,5	362,0
8	371,7	368,7	365,9	363,2	360,8
9	369,9	366,9	364,0	361,4	358,9
10	368,0	364,9	362,0	359,4	356,9
11	365,9	362,8	359,9	357,3	354,8
12	363,5	360,4	357,6	354,9	352,4
13	360,9	357,8	354,9	352,3	349,8
14	357,8	354,7	351,8	349,2	346,7
15	354,0	350,9	348,1	345,4	343,0
16	349,4	346,4	343,6	341,1	338,7
17	345,0	342,1	339,4	336,8	334,5
18	340,2	337,4	334,8	332,4	330,1

Παράδειγμα 7

A. Εκφώνηση

Ζητούνται τα γραμμομοριακά κλάσματα στο απόσταγμα και στο υπόλειμμα και η κατανομή θερμοκρασίας εντός αποστακτικής στήλης που διαχωρίζει μίγμα τροφοδοσίας με γραμμομοριακή παροχή $F=100$ kmoles/h και σύσταση :

Πίνακας Π6-43: Γραμμομοριακά κλάσματα των συστατικών του μίγματος τροφοδοσίας του παραδείγματος 7.

Συστατικά	z_i
Ισοβουτάνιο	0,1200
κ-Βουτάνιο	0,3100
κ-Πεντάνιο	0,1700
κ-Εξάνιο	0,4000

Η τροφοδοσία είναι κορεσμένο υγρό, δηλαδή $q = 1$. Η πίεση λειτουργίας της στήλης είναι 3,4 atm και ο αριθμός των θεωρητικών βαθμίδων της είναι 10. Οι βαθμίδες κάτω από τη βαθμίδα τροφοδοσίας είναι 5. Η γραμμομοριακή παροχή του αποστάγματος είναι 60 kmoles/h και η παροχή της αναρροής είναι 132 kmoles/h. Ο αναβραστήρας της αποστακτικής στήλης είναι μερικός και ο συμπυκνωτήρας ολικός.

Β. Αποτελέσματα και σύγκριση

Τα γραμμομοριακά κλάσματα αποστάγματος και υπολείμματος, όπως αυτά προκύπτουν από τα δύο πρότυπα, και οι αντίστοιχες αποκλίσεις φαίνονται στον πίνακα Π6-44.

Πίνακας Π6-44 : Γραμμομοριακά κλάσματα υπολείμματος και αποστάγματος με βάση την απλοποιημένη και την αναλυτική μέθοδο και η μεταξύ τους απόκλιση για το παράδειγμα 7.

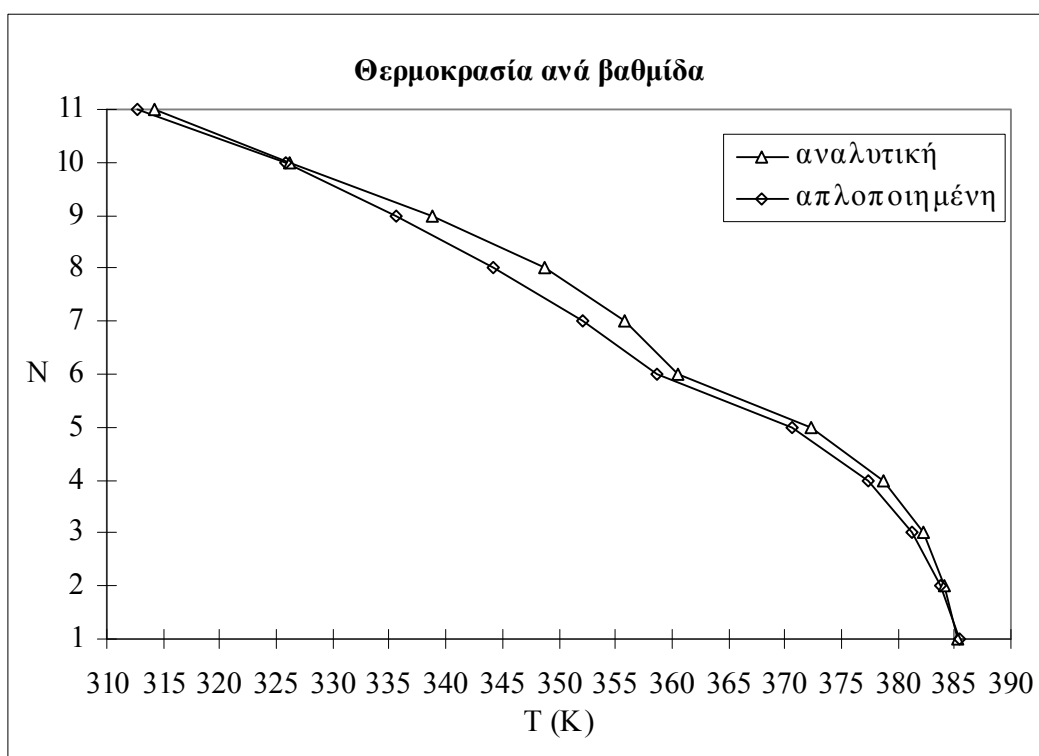
Συστατικά	$x_{i,B}$ (αν)	$x_{i,B}$ (απ)	$1000\Delta x_{i,B}$	$x_{i,D}$ (αν)	$x_{i,D}$ (απ)	$1000\Delta x_{i,D}$
Ισοβουτάνιο	0,0000	0,0000	0,0	0,2000	0,2000	0,0
κ-Βουτάνιο	0,0003	0,0002	0,1	0,5165	0,5165	-0,1
κ-Πεντάνιο	0,0244	0,0360	-11,7	0,2671	0,2593	7,8
κ-Εξάνιο	0,9753	0,9638	11,6	0,0164	0,0242	-7,7
		ΜΕΣ.Α	5,8		ΜΕΣ.Α	3,9
		ΜΕΓ.Α	11,7		ΜΕΓ.Α	7,8

Η κατανομή θερμοκρασίας εντός της αποστακτικής στήλης για κάθε μία από τις δύο προσεγγίσεις και η μεταξύ τους απόκλιση περιγράφεται στον πίνακα Π6-45 και απεικονίζεται στο σχήμα Π6-13.

Πίνακας Π6-45 : Θερμοκρασία σε κάθε βαθμίδα της αποστακτικής στήλης με βάση την απλοποιημένη και την αναλυτική μέθοδο και η μεταξύ τους απόκλιση για το παράδειγμα 7.

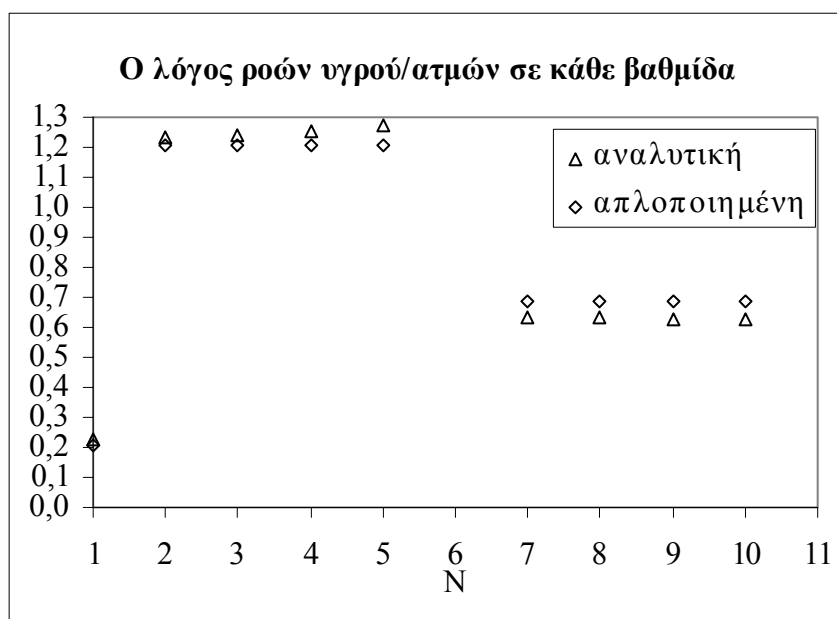
N	T_i (αν)(K)	T_i (απ)(K)	% ΔT_i
---	---------------	---------------	-----------------

1	385,3	385,5	0,0
2	384,2	383,8	0,1
3	382,2	381,3	0,2
4	378,8	377,4	0,4
5	372,3	370,6	0,5
6	360,6	358,6	0,5
7	355,8	352,2	1,0
8	348,7	344,1	1,3
9	338,9	335,6	1,0
10	326,2	325,9	0,1
11	314,1	312,6	0,5
	ΜΕΣ.Α		0,5
	ΜΕΓ.Α		1,3



Σχήμα Π6-13 : Κατανομή θερμοκρασίας εντός της αποστακτικής στήλης με βάση την απλοποιημένη και την αναλυτική μέθοδο για το παράδειγμα 7.

Ο λόγος των γραμμομοριακών ροών στο τμήμα εξάντλησης και στο τμήμα εμπλουτισμού φαίνεται στο σχήμα Π6-14.



Σχήμα Π6-14 : Μεταβολή του λόγου γραμμομοριακής ροής υγρού προς γραμμομοριακή ροή ατμών εντός της στήλης για το παράδειγμα 7.

Η μεταβολή των λόγων ισορροπίας στο εσωτερικό της στήλης για κάθε συστατικό φαίνεται στον πίνακα Π6-46.

Πίνακας Π6-46 : Μεταβολή των λόγων ισορροπίας με τη θερμοκρασία σε κάθε βαθμίδα για το παράδειγμα 7, όπως αυτή προβλέπεται από τη συσχέτιση McWilliams.

Συστατικά → Βαθμίδα ↓	Προπάνιο	κ-Βουτάνιο	κ-Πεντάνιο	κ-Εξάνιο
1	5,452	4,557	1,968	0,963
2	5,339	4,453	1,915	0,933
3	5,168	4,297	1,835	0,888
4	4,906	4,058	1,714	0,820
5	4,472	3,667	1,519	0,712
6	3,742	3,015	1,203	0,543
7	3,372	2,689	1,050	0,463
8	2,940	2,314	0,878	0,376
9	2,515	1,949	0,716	0,296
10	2,073	1,577	0,556	0,220
11	1,544	1,141	0,379	0,141

Γ. Ανάλυση ευαισθησίας

Πίνακας Π6-47 : Μεταβολή της σύστασης του υπολείμματος σε σχέση με την %απόκλιση των λόγων ισορροπίας από τους υπολογιζόμενους με την εξίσωση McWilliams. Τα αποτελέσματα αναφέρονται στο παράδειγμα 7.

Μεταβολή των $K_i \rightarrow$ Συστατικά ↓	-10%	-5%	0%	5%	10%
Ισοβουτάνιο	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
κ-Βουτάνιο	0,0002	0,0002	0,0002	0,0002	0,0002
κ-Πεντάνιο	0,0384	0,0372	0,0360	0,0350	0,0340
κ-Εξάνιο	0,9613	0,9626	0,9638	0,9648	0,9658

Πίνακας Π6-48 : Μεταβολή της σύστασης του αποστάγματος σε σχέση με την %απόκλιση των λόγων ισορροπίας από τους υπολογιζόμενους με την εξίσωση McWilliams. Τα αποτελέσματα αναφέρονται στο παράδειγμα 7.

Μεταβολή των $K_i \rightarrow$ Συστατικά ↓	-10%	-5%	0%	5%	10%
Ισοβουτάνιο	0,2000	0,2000	0,2000	0,2000	0,2000
κ-Βουτάνιο	0,5165	0,5165	0,5165	0,5166	0,5166
κ-Πεντάνιο	0,2577	0,2585	0,2593	0,2600	0,2607
κ-Εξάνιο	0,0258	0,0249	0,0242	0,0234	0,0228

Πίνακας Π6-49 : Μεταβολή της θερμοκρασίας (K) σε κάθε βαθμίδα σε σχέση με την %απόκλιση των λόγων ισορροπίας από τους υπολογιζόμενους με την εξίσωση McWilliams. Τα αποτελέσματα αναφέρονται στο παράδειγμα 7.

Μεταβολή των $K_i \rightarrow$ Βαθμίδα ↓	-10%	-5%	0%	5%	10%
1	391,0	388,1	385,5	383,0	380,7
2	389,3	386,5	383,8	381,4	379,1
3	386,6	383,9	381,3	378,9	376,6
4	382,6	379,9	377,4	375,0	372,8
5	375,7	373,1	370,6	368,4	366,3
6	363,5	361,0	358,6	356,4	354,4
7	357,0	354,5	352,2	350,0	347,9
8	348,9	346,4	344,1	342,0	340,0
9	340,2	337,8	335,6	333,5	331,6
10	330,3	328,0	325,9	323,9	322,1
11	316,8	314,6	312,6	310,7	309,0

Παράδειγμα 8

A. Εκφώνηση

Ζητούνται τα γραμμομοριακά κλάσματα στο απόσταγμα και στο υπόλειμμα και η κατανομή θερμοκρασίας εντός αποστακτικής στήλης που διαχωρίζει μίγμα τροφοδοσίας με γραμμομοριακή παροχή $F=100$ kmoles/h και σύσταση :

Πίνακας Π6-50 : Γραμμομοριακά κλάσματα των συστατικών του μίγματος τροφοδοσίας του παραδείγματος 8.

Συστατικά	z_i
Προπάνιο	0,0560
κ-Βουτάνιο	0,3210
κ-Πεντάνιο	0,4820
κ-Εξάνιο	0,1410

Η τροφοδοσία είναι κορεσμένο υγρό, δηλαδή $q = 1$. Η πίεση λειτουργίας της στήλης είναι 4 atm και ο αριθμός των θεωρητικών βαθμίδων της είναι 11. Οι βαθμίδες κάτω από τη βαθμίδα τροφοδοσίας είναι 6. Η γραμμομοριακή παροχή του αποστάγματος είναι 50 kmoles/h και η παροχή της αναρροής είναι 175 kmoles/h. Ο αναβραστήρας της αποστακτικής στήλης είναι μερικός και ο συμπυκνωτήρας ολικός.

B. Αποτελέσματα και σύγκριση

Τα γραμμομοριακά κλάσματα αποστάγματος και υπολείμματος, όπως αυτά προκύπτουν από τα δύο πρότυπα, και οι αντίστοιχες αποκλίσεις φαίνονται στον πίνακα Π6-51.

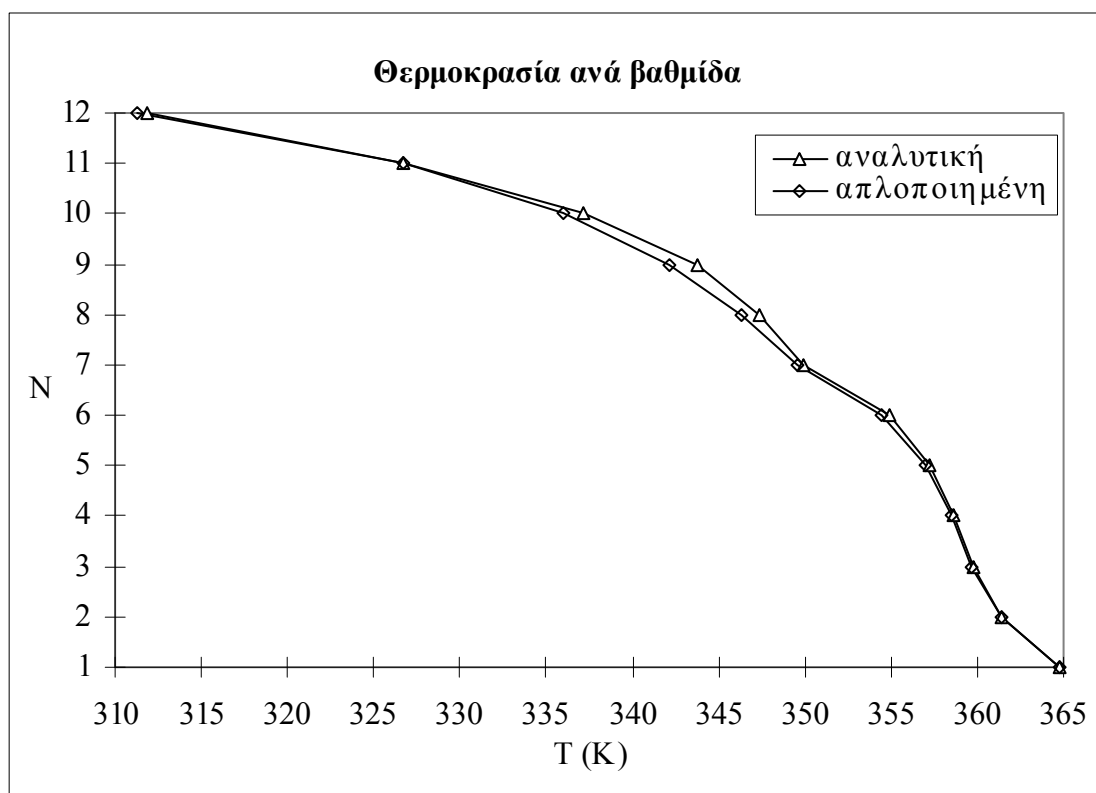
Πίνακας Π6-51 : Γραμμομοριακά κλάσματα υπολείμματος και αποστάγματος με βάση την απλοποιημένη και την αναλυτική μέθοδο και η μεταξύ τους απόκλιση για το παράδειγμα 8.

Συστατικά	$x_{i,B}$ (αυ)	$x_{i,B}$ (απ)	$1000\Delta x_{i,B}$	$x_{i,D}$ (αυ)	$x_{i,D}$ (απ)	$1000\Delta x_{i,D}$
Προπάνιο	0,0000	0,0000	0,0	0,1120	0,1120	0,0
κ-Βουτάνιο	0,0008	0,0012	-0,4	0,6412	0,6408	0,4
κ-Πεντάνιο	0,7175	0,7173	0,2	0,2465	0,2467	-0,2
κ-Εξάνιο	0,2817	0,2815	0,3	0,0003	0,0005	-0,3
		ΜΕΣ.Α	0,2		ΜΕΣ.Α	0,2
		ΜΕΓ.Α	0,4		ΜΕΓ.Α	0,4

Η κατανομή θερμοκρασίας εντός της αποστακτικής στήλης για κάθε μία από τις δύο προσεγγίσεις και η μεταξύ τους απόκλιση περιγράφεται στον πίνακα Π6-52 και απεικονίζεται στο σχήμα Π6-15.

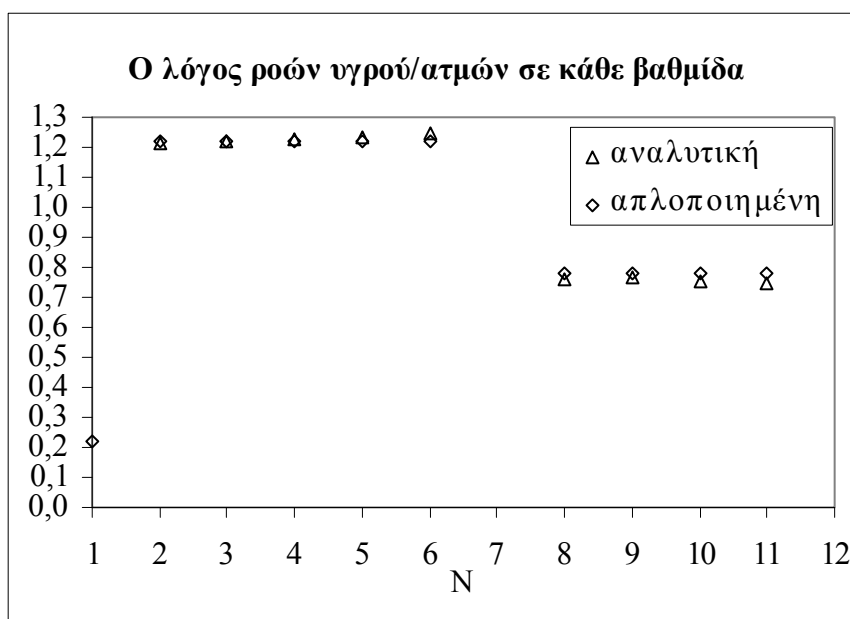
Πίνακας Π6-52 : Θερμοκρασία σε κάθε βαθμίδα της αποστακτικής στήλης με βάση την απλοποιημένη και την αναλυτική μέθοδο και η μεταξύ τους απόκλιση για το παράδειγμα 8.

N	T _i (αν)(K)	T _i (απ)(K)	% ΔT _i
1	364,8	364,7	0,0
2	361,4	361,4	0,0
3	359,7	359,7	0,0
4	358,6	358,5	0,0
5	357,3	357,0	0,1
6	354,8	354,5	0,1
7	349,9	349,6	0,1
8	347,4	346,4	0,3
9	343,7	342,2	0,5
10	337,2	336,0	0,3
11	326,7	326,7	0,0
12	311,8	311,3	0,2
ΜΕΣ.Α			0,1
ΜΕΓ.Α			0,5



Σχήμα Π6-15 : Κατανομή θερμοκρασίας εντός της αποστακτικής στήλης με βάση την απλοποιημένη και την αναλυτική μέθοδο για το παράδειγμα 8.

Ο λόγος των γραμμομοριακών ροών στο τμήμα εξάντλησης και στο τμήμα εμπλουτισμού φαίνεται στο σχήμα Π6-16.



Σχήμα Π6-16 : Μεταβολή του λόγου γραμμομοριακής ροής υγρού προς γραμμομοριακή ροή ατμών εντός της στήλης για το παράδειγμα 8.

Η μεταβολή των λόγων ισορροπίας στο εσωτερικό της στήλης για κάθε συστατικό φαίνεται στον πίνακα Π6-53.

Πίνακας Π6-53 : Μεταβολή των λόγων ισορροπίας με τη θερμοκρασία σε κάθε βαθμίδα για το παράδειγμα 8, όπως αυτή προβλέπεται από τη συσχέτιση McWilliams.

Συστατικά → Βαθμίδα ↓	Προπάνιο	κ-Βουτάνιο	κ-Πεντάνιο	κ-Εξάνιο
1	6,552	2,855	1,176	0,545
2	6,284	2,701	1,101	0,505
3	6,149	2,625	1,064	0,485
4	6,056	2,573	1,039	0,472
5	5,942	2,509	1,008	0,455
6	5,742	2,399	0,955	0,428
7	5,367	2,194	0,859	0,378
8	5,128	2,066	0,800	0,348
9	4,823	1,905	0,726	0,311
10	4,386	1,681	0,626	0,261
11	3,764	1,374	0,492	0,197
12	2,833	0,944	0,315	0,117

Γ. Ανάλυση ευαισθησίας

Πίνακας Π6-54 : Μεταβολή της σύστασης του υπολείμματος σε σχέση με την %απόκλιση των λόγων ισορροπίας από τους υπολογιζόμενους με την εξίσωση McWilliams. Τα αποτελέσματα αναφέρονται στο παράδειγμα 8.

Μεταβολή των $K_i \rightarrow$ Συστατικά ↓	-10%	-5%	0%	5%	10%
Προπάνιο	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
κ-Βουτάνιο	0,0014	0,0013	0,0012	0,0011	0,0011
κ-Πεντάνιο	0,7172	0,7173	0,7173	0,7174	0,7174
κ-Εξάνιο	0,2814	0,2814	0,2815	0,2815	0,2815

Πίνακας Π6-55 : Μεταβολή της σύστασης του αποστάγματος σε σχέση με την %απόκλιση των λόγων ισορροπίας από τους υπολογιζόμενους με την εξίσωση McWilliams. Τα αποτελέσματα αναφέρονται στο παράδειγμα 8.

Μεταβολή των $K_i \rightarrow$ Συστατικά ↓	-10%	-5%	0%	5%	10%
Προπάνιο	0,1120	0,1120	0,1120	0,1120	0,1120
κ-Βουτάνιο	0,6406	0,6407	0,6408	0,6409	0,6409
κ-Πεντάνιο	0,2468	0,2467	0,2467	0,2466	0,2466
κ-Εξάνιο	0,0006	0,0006	0,0005	0,0005	0,0005

Πίνακας Π6-56 : Μεταβολή της θερμοκρασίας (K) σε κάθε βαθμίδα σε σχέση με την %απόκλιση των λόγων ισορροπίας από τους υπολογιζόμενους με την εξίσωση McWilliams. Τα αποτελέσματα αναφέρονται στο παράδειγμα 8.

Μεταβολή των $K_i \rightarrow$ Βαθμίδα ↓	-10%	-5%	0%	5%	10%
1	370,1	367,3	364,7	362,3	360,0
2	366,7	363,9	361,4	359,0	356,7
3	365,0	362,2	359,7	357,3	355,1
4	363,7	361,0	358,5	356,2	354,0
5	362,1	359,5	357,0	354,8	352,6
6	359,5	356,9	354,5	352,2	350,2
7	354,4	351,9	349,6	347,4	345,4
8	351,1	348,6	346,4	344,2	342,3
9	346,8	344,4	342,2	340,1	338,2
10	340,5	338,1	336,0	334,0	332,1
11	331,1	328,8	326,7	324,8	322,9
12	315,7	313,4	311,3	309,4	307,5

Παράρτημα 7

Ο κώδικας του προγράμματος

Ο κώδικας του προγράμματος είναι γραμμένος στη VISUAL BASIC του EXCEL 5.0. Το πρώτο μέρος του κώδικα αναφέρεται στην υλοποίηση της διαδικασίας επίλυσης του μαθηματικού προτύπου. Το δεύτερο τμήμα του κώδικα περιλαμβάνει τις υπορουτίνες με βάση τις οποίες αναπτύσσεται το περιβάλλον επικοινωνίας χρήστη-προγράμματος.

1ο μέρος του κώδικα :

MODULE MAIN

Option Private Module

Option Base 1

Option Explicit

```
Public NOFC As Integer, Z(14) As Double, Feed As Double, _
    N As Integer, M As Integer, P As Double, R As Double, Tf As Double, _
    q As Double, XF(14) As Double, YF(14) As Double, _
    B As Double, XB(14) As Double, XBnew(14) As Double, _
    D As Double, XD(14) As Double, L As Double, _
    V As Double, Ls As Double, Vs As Double, TN As Double, _
    T1 As Double, TM_1 As Double, Tn_ As Double, Tm_ As Double, _
    Sn(14) As Double, Sm(14) As Double, h(14) As Double, _
    fr(20) As Double, TD As Double, Qc As Double, Qr As Double, _
    XL(50, 14) As Double, YV(50, 14) As Double, Temp(50) As Double
Public Y1(14) As Double, YN(14) As Double, XN(14) As Double, T0 As Double, _
    C As Integer, X2(14) As Double, YN_1(14) As Double
Public NofP As Integer, MinVal As Double, MaxVal As Double, DX As Double, _
    COUNTER1 As Integer
Public dPa1(14) As Double, dPa2(14) As Double, dPa3(14) As Double, _
    dPb1(14) As Double, dPb2(14) As Double, dPb3(14) As Double
Public A1(14) As Double, A2(14) As Double, A3(14) As Double, _
    ac1(14) As Double, ac2(14) As Double, ac3(14) As Double, _
    ac4(14) As Double, ac5(14) As Double, Pc(14) As Double
```

'Subroutine prob3 solves the problem in which
'an independent variable changes

Public Sub prob3()

Dim I As Integer

NofP = Range("NofP").Value

MinVal = Range("MinVal").Value

MaxVal = Range("MaxVal").Value

DX = (MaxVal - MinVal) / (NofP - 1)

Range("indep").ClearContents

Range("name").ClearContents

If Range("Statusq").Value = True Then

For COUNTER1 = 1 To NofP

Range("qh").Value = MinVal + (COUNTER1 - 1) * DX

Range("qCV").Value = (Range("qh").Value _

- Range("qmin").Value) * 100 / _

(Range("qmax").Value - Range("qmin").Value)

Range("indep")(COUNTER1).Value = Range("qh").Value

Call problem1

Call problem2

Call res

Next COUNTER1

Range("name").Value = "q"

GoTo 10
End If

```
If Range("StatusD").Value = True Then
  For COUNTER1 = 1 To NofP
    Range("Dh").Value = MinVal + (COUNTER1 - 1) * DX
    Range("DCV").Value = (Range("Dh").Value _
      - Range("Dmin").Value) * 100 / _
      (Range("Dmax").Value - Range("Dmin").Value)
    Range("indep")(COUNTER1).Value = Range("Dh").Value
    Call problem1
    Call problem2
    Call res
  Next COUNTER1
Range("name").Value = "D(kmol/h)"
GoTo 10
End If
```

```
If Range("StatusN").Value = True Then
  NofP = MaxVal - MinVal + 1
  Range("Nofp").Value = NofP
  DX = 1
  For COUNTER1 = 1 To NofP
    Range("Nh").Value = MinVal + (COUNTER1 - 1) * DX
    Range("NCV").Value = (Range("Nh").Value _
      - Range("Nmin").Value) * 100 / _
      (Range("Nmax").Value - Range("Nmin").Value)
    Range("indep")(COUNTER1).Value = Range("Nh").Value
    Call problem1
    Call problem2
    Call res
  Next COUNTER1
Range("name").Value = "N"
GoTo 10
End If
```

```
If Range("StatusM").Value = True Then
  NofP = MaxVal - MinVal + 1
  Range("Nofp").Value = NofP
  DX = 1
  For COUNTER1 = 1 To NofP
    Range("Mh").Value = MinVal + (COUNTER1 - 1) * DX
    Range("MCV").Value = (Range("Mh").Value _
      - Range("Mmin").Value) * 100 / _
      (Range("Mmax").Value - Range("Mmin").Value)
    Range("indep")(COUNTER1).Value = Range("Mh").Value
    Call problem1
    Call problem2
    Call res
  Next COUNTER1
Range("name").Value = "M"
GoTo 10
End If
```

```
If Range("StatusP").Value = True Then
  For COUNTER1 = 1 To NofP
    Range("Ph").Value = MinVal + (COUNTER1 - 1) * DX
    Range("PCV").Value = (Range("Ph").Value _
      - Range("Pmin").Value) * 100 / _
      (Range("Pmax").Value - Range("Pmin").Value)
    Range("indep")(COUNTER1).Value = Range("Ph").Value
    Call problem1
```

```

    Call problem2
    Call res
  Next COUNTER1
  Range("name").Value = "P (atm)"
  GoTo 10
End If

If Range("StatusL").Value = True Then
  For COUNTER1 = 1 To NofP
    Range("Lh").Value = MinVal + (COUNTER1 - 1) * DX
    Range("LCV").Value = (Range("Lh").Value _
      - Range("Lmin").Value) * 100 / _
      (Range("Lmax").Value - Range("Lmin").Value)
    Range("indep")(COUNTER1).Value = Range("Lh").Value
    Call problem1
    Call problem2
    Call res
  Next COUNTER1
  Range("name").Value = "L(kmol/h)"
  GoTo 10
End If

```

10 End Sub

Public Sub prob12()

'Counter1 calculates the number of times subroutine prob12 runs

```

COUNTER1 = 1
  Range("indep").ClearContents
  Range("name").ClearContents

```

Call problem1

Call problem2

```

Application.ScreenUpdating = False
Call res
Application.ScreenUpdating = True

```

End Sub

Public Sub problem1()

```

Dim I As Integer, sumZ As Double

```

'Counter1 calculates the number of times subroutine prob12 runs

```

  If COUNTER1 = 1 Then

```

'Which are the compounds of the mixture

```

  Call inform

```

'Properties for the compounds

```

  Call properties

```

```

  End If

```

'Data values from sheet :

```

  For I = 1 To NOFC
    Z(I) = Range("Z")(I).Value
  Next I

```

```

  Feed = Range("Feed").Value
  D = Range("D").Value
  q = Range("q").Value
  N = Range("N").Value

```

```

M = Range("M").Value
P = Range("P").Value
L = Range("L").Value
'Normalization of Zi
sumZ = 0
For I = 1 To NOFC
sumZ = sumZ + Z(I)
Next I
,
For I = 1 To NOFC
Z(I) = Z(I) / sumZ
Next I
'Call the model for the solution of the problem
Call model1
'Call the sub which presents the results
Beep
End Sub

```

'Subroutine Problem2 gives the composition and
'temperature profile of the column.

Public Sub problem2()

'Call the model for the solution of the problem

Call model2

'Call the sub which presents the results

Beep

,

End Sub

'Subroutine solves the system of equations for problem1

Public Sub model1()

Dim NOFITER1 As Integer, NOFITER2 As Integer, MAXITER1 As Integer, _

COUNTER2 As Integer, I As Integer, Tk As Double, Tk_1 As Double, _

Tk_2 As Double, e1 As Double, e2 As Double, _

TOL1 As Double, TOL2 As Double, _

DT As Double, prevplus As Double, prevminus As Double, MAXITER2 As Integer, _

SumXB As Double, sumYN As Double, _

SumXBnew2 As Double, NofL As Integer, SumXD As Double

'Initial values for the Number Of ITERations

'NOFITER1 is the number of iterations for the loop of XBi

NOFITER1 = 0

'NOFITER2 is the number of iterations for the loop of TM+1

NOFITER2 = 0

'Max iterations for the loop of XBi

MAXITER1 = 50

'Max iterations for the loop of Tm+1

MAXITER2 = 50

'TOL1 : Tolerance for e1 =abs(XBnew(i)-XB(i))/XBnew(i))

TOL1 = 0.01

'TOL2 : Tolerance for e2 =Abs(Tk_2 - Tk_1) / Tk_1

TOL2 = 0.0000000001

'For the streams in the column :

B = Feed - D

R = L / D

V = L + D

's = stripping

Ls = L + q * Feed

Vs = Ls - B

'Start of First loop of iterations : XBi

```

'Counter1 calculates the number of times subroutine prob12 runs
'Initial values for XBi and XDi
  If COUNTER1 = 1 Then
    NofL = Int(NOFC / 2)
    For I = 1 To NofL
      XB(I) = 0
      XD(I) = Z(I) * Feed / D
    Next I
    For I = NofL + 1 To NOFC
      XB(I) = Z(I) * Feed / B
      XD(I) = 0
    Next I
'Normalization of initial values of XBi,XDi
  SumXB = 0
  SumXD = 0
  For I = 1 To NOFC
    SumXB = SumXB + XB(I)
    SumXD = SumXD + XD(I)
  Next I
  For I = 1 To NOFC
    XB(I) = XB(I) / SumXB
    XD(I) = XD(I) / SumXD
  Next I
Else
  For I = 1 To NOFC
    XB(I) = Range("XB")(I, COUNTER1 - 1).Value
  Next I
End If
10  NOFITER1 = NOFITER1 + 1
    Range("NOFITER1").Value = NOFITER1

    If NOFITER1 > MAXITER1 Then
      Range("iterXBi").Value = "fail"
      Stop
    End If

'XDi calculation
  If NOFITER1 <> 1 Then
    For I = 1 To NOFC
      XD(I) = (Z(I) * Feed - B * XB(I)) / D
    Next I
  End If
'TD calculation If :
  If Range("PARTCOND").Value = True Then
'If the condenser is partial
    TD = TDP(XD(), P)
  Else
'If the condenser is total
    TD = TBP(XD(), P)
  End If
'YNi calculation
  For I = 1 To NOFC
    YN(I) = XD(I)
  Next I
'T1, TN calculation
  TN = TDP(YN(), P)
  T1 = TBP(XB(), P)
'Start of Second loop of iterations : TM+1
'NOFITER2 is the number of false position method's iterations in the second loop
  NOFITER2 = 0
20  NOFITER2 = NOFITER2 + 1
    Range("NOFITER2").Value = NOFITER2

```

```

'Tkinitial
  If NOFITER2 = 1 Then
    Tk = TN + (1 / 3) * (T1 - TN)
    Tk_1 = TN + (2 / 3) * (T1 - TN)
  End If
'New value for TM_1 on the sheet
  Range("TM").Value = Tk_2
  If NOFITER2 > MAXITER2 Then
    Range("iterTm_1").Value = "fail"
    Stop
  End If
'New value for TM_1 with the false-position method
'fun(T)= SumXBnew - 1
  Tk_2 = Tk_1 - fun(Tk_1) * _
    ((Tk_1 - Tk) / (fun(Tk_1) - fun(Tk)))
  e2 = Abs(Tk_2 - Tk_1) / Tk_1
  If e2 > TOL2 Then
    Tk = Tk_1
    Tk_1 = Tk_2
    GoTo 20
  End If
'Final value for TM_1 :
  TM_1 = Tk_2
'End of second loop
'COUNTER2 shows if all XBiNEW are equal to XBi
  COUNTER2 = 0
'Normalization of XBnew, because SUMXBNEW maybe not equal to 1
  SumXBnew2 = 0
  For I = 1 To NOFC
    SumXBnew2 = SumXBnew2 + XBnew(I)
  Next I
  For I = 1 To NOFC
    XBnew(I) = XBnew(I) / SumXBnew2
  Next I
  For I = 1 To NOFC
    e1 = Abs((XBnew(I) - XB(I)) / XBnew(I))
    If e1 > TOL1 Then COUNTER2 = COUNTER2 + 1
  Next I
'Tranfer of the value of COUNTER2 to the sheet
  Range("COUNTER2").Value = COUNTER2
  If COUNTER2 <> 0 Then
    For I = 1 To NOFC
      XB(I) = XBnew(I)
    Next I
    Range("NOFITER1").Value = NOFITER1
    GoTo 10
  End If
'End of first loop
End Sub

```

```

'Subroutine model2 constructs the composition profile
Public Sub model2()
  Dim sum As Double, XLhelp(14) As Double, I As Integer, _
    J As Integer, UC1 As Double, KJ As Double
'Molar fractions for the stripping and rectifying section
'Unnormalized Molar fractions of Liquid phase
'For the first tray
  For J = 1 To NOFC
    XL(1, J) = XB(J)
  Next J

```

```

'For the stripping section
  For I = 2 To M
    For J = 1 To NOFC
      KJ = KV(J, P, Tm_)
      XL(I, J) = XB(J) * _
        (1 + (1 - 1 / KJ) * _
          (Sm(J) ^ I - Sm(J))) / (Sm(J) - 1)
    Next J
  Next I
'For the rectifying section
  For I = M + 2 To N - 1
    For J = 1 To NOFC
      KJ = KV(J, P, Tn_)
      XL(I, J) = (XD(J) / KJ) * _
        (1 + (1 - KJ) * _
          ((1 / Sn(J)) ^ (N + 1 - I) - (1 / Sn(J))) / _
          ((1 / Sn(J)) - 1))
    Next J
  Next I
'For the N-th tray
  For J = 1 To NOFC
    XL(N, J) = YN(J) / KV(J, P, TN)
  Next J
'For the feed tray (M+1)
  For J = 1 To NOFC
    XL(M + 1, J) = (L / (KV(J, P, TM_1) * V + Ls)) * XL(M + 2, J) + _
      ((Vs * KV(J, P, Tm_) / (KV(J, P, TM_1) * V + Ls)) * XL(M, J) + _
      (Feed / (KV(J, P, TM_1) * V + Ls)) * Z(J)
  Next J
'Normalization of Liquid molar fractions
  For I = 1 To N
    sum = 0
    For J = 1 To NOFC
      sum = sum + XL(I, J)
    Next J
    For J = 1 To NOFC
      XL(I, J) = XL(I, J) / sum
    Next J
  Next I
'Tray Temperature
  For I = 1 To N
    For J = 1 To NOFC
      XLhelp(J) = XL(I, J)
    Next J
    Temp(I) = TBP(XLhelp(), P)
  Next I
'Molar fraction of vapor phase
  For I = 1 To N
    For J = 1 To NOFC
      YV(I, J) = KV(J, P, Temp(I)) * XL(I, J)
    Next J
  Next I
'Qc in MW
'UC1 = (1/3600) h/sec
UC1 = 1 / 3600
If Range("PARTCOND").Value = True Then
'If the condenser is partial
  For J = 1 To NOFC
'XN : composition of reflux when the condenser is partial
  XN(J) = XL(N, J)
  YN_1(J) = YV(N - 1, J)
  Next J

```



```

    Qc = UC1 * _
      (V * hmv(YN_1(), Temp(N - 1)) - _
      D * hmv(XD(), TD) - _
      L * hml(XN(), TD))
  Else
  'If the condenser is total
    Qc = UC1 * (V * (hmv(YN(), Temp(N)) - hml(XD(), TD)))
  End If
  'Qc in MW
  If Range("PARTREBOIL").Value = True Then
  'If the reboiler is partial
    For J = 1 To NOFC
  'Y1 and X2 are composition of vapor on the tray 1 and
  ' composition of liquid on the tray 2
    Y1(J) = YV(1, J)
    X2(J) = XL(2, J)
    Next J
    Qr = UC1 * _
      (Vs * hmv(Y1(), Temp(1)) + B * hml(XB(), Temp(1)) - _
      Ls * hml(X2(), Temp(2)))
  Else
  'If the reboiler is total
  'T0 is the temperatute of the vapor leaving reboiler when it is total
    T0 = TDP(XB(), P)
    Qr = UC1 * Vs * (hmv(XB(), T0) - hml(XB(), Temp(1)))
  End If
  End Sub

```

```

'Sub Res
'Subroutine transfers the final values for the variables
'of the system to the sheet.

```

Public Sub res()

Dim I As Integer, J As Integer, NTmax As Integer

NTmax = Range("NTmax").Value

For I = 1 To NOFC

Range("XB")(I, COUNTER1).Value = XB(I)

Range("XD")(I, COUNTER1).Value = XD(I)

Range("Sn")(I, COUNTER1).Value = Sn(I)

Range("Sm")(I, COUNTER1).Value = Sm(I)

Range("h")(I, COUNTER1).Value = h(I)

Range("f")(I, COUNTER1).Value = fr(I)

Range("fd")(I, COUNTER1).Value = 1 - fr(I)

Next I

Range("COUNTER1").Value = COUNTER1

Range("TM_1")(COUNTER1).Value = TM_1

Range("B")(COUNTER1).Value = B

Range("R_")(COUNTER1).Value = R

Range("V")(COUNTER1).Value = V

Range("Ls")(COUNTER1).Value = Ls

Range("Vs")(COUNTER1).Value = Vs

Range("TN")(COUNTER1).Value = TN

Range("T1_")(COUNTER1).Value = T1

Range("Tn_")(COUNTER1).Value = Tn_

Range("Tm_")(COUNTER1).Value = Tm_

Range("TD")(COUNTER1).Value = TD

```

    Range("Qc")(COUNTER1).Value = Qc
    Range("Qr")(COUNTER1).Value = Qr
'For the profiles
For J = 1 To NOFC
    For I = 1 To N
        Range("XL")((J - 1) * NTmax + I, COUNTER1).Value = XL(I, J)
    Next I
Next J

    For I = 1 To N
        Range("Temp")(I, COUNTER1).Value = Temp(I)
    Next I

For J = 1 To NOFC
    For I = 1 To N
        Range("YV")((J - 1) * NTmax + I, COUNTER1).Value = YV(I, J)
    Next I
Next J
'For the distillation column picture
If Range("PARTREBOIL").Value = False And Range("PARTCOND").Value = False Then
    Call tctr1
    GoTo 100
End If
If Range("PARTREBOIL").Value = True And Range("PARTCOND").Value = False Then
    Call tcpr1
    GoTo 100
End If
If Range("PARTREBOIL").Value = True And Range("PARTCOND").Value = True Then
    Call pcpr1
    GoTo 100
End If
If Range("PARTREBOIL").Value = False And Range("PARTCOND").Value = True Then
    Call pctr1
    GoTo 100
End If
100
End Sub

```

Public Sub properties()

```

Dim I As Integer
NOFC = Range("NOFC").Value
For I = 1 To NOFC
    A1(I) = Range("A1_")(I).Value
    A2(I) = Range("A2_")(I).Value
    A3(I) = Range("A3_")(I).Value
,
    ac1(I) = Range("ac1_")(I).Value
    ac2(I) = Range("ac2_")(I).Value
    ac3(I) = Range("ac3_")(I).Value
    ac4(I) = Range("ac4_")(I).Value
    ac5(I) = Range("ac5_")(I).Value
,
    dPa1(I) = Range("dPa1")(I).Value
    dPa2(I) = Range("dPa2")(I).Value
    dPa3(I) = Range("dPa3")(I).Value
    dPb1(I) = Range("dPb1")(I).Value
    dPb2(I) = Range("dPb2")(I).Value
    dPb3(I) = Range("dPb3")(I).Value
Next I
End Sub

```

```
'Sub inform
'Subroutine finds the mixture's compounds from the list
  Public Sub inform()
    Dim I As Integer, K As Integer, J As Integer
'Set all data " "
    Range("vars1dim").ClearContents
    Range("Compd").ClearContents
    Range("Z").ClearContents
    Range("XB").ClearContents
    Range("XD").ClearContents
    Range("Sn").ClearContents
    Range("Sm").ClearContents
    Range("h").ClearContents
    Range("f").ClearContents
    Range("fd").ClearContents
    ,
    Range("XL").ClearContents
    ,
    Range("Temp").ClearContents
    ,
    Range("YV").ClearContents
    ,
    Range("data").ClearContents
'K is the number of the compound selected (first,second,...)
'I is the characteristic number for the compound selected from the list
  K = 0
  For I = 1 To 14
    If Range("ZZ")(I) = 0 Then GoTo 10
'Data transfer from Database to Data
    K = K + 1
    Range("Compa")(K).Value = Range("Compounds")(I).Value
    Range("Compd")(K).Value = Range("Compounds")(I).Value
    Range("A1_")(K).Value = Range("dA1_")(I).Value
    Range("A2_")(K).Value = Range("dA2_")(I).Value
    Range("A3_")(K).Value = Range("dA3_")(I).Value
    Range("ac1_")(K).Value = Range("dac1_")(I).Value
    Range("ac2_")(K).Value = Range("dac2_")(I).Value
    Range("ac3_")(K).Value = Range("dac3_")(I).Value
    Range("ac4_")(K).Value = Range("dac4_")(I).Value
    Range("ac5_")(K).Value = Range("dac5_")(I).Value
    Range("dPa1")(K).Value = Range("ddPa1")(I).Value
    Range("dPa2")(K).Value = Range("ddPa2")(I).Value
    Range("dPa3")(K).Value = Range("ddPa3")(I).Value
    Range("dPb1")(K).Value = Range("ddPb1")(I).Value
    Range("dPb2")(K).Value = Range("ddPb2")(I).Value
    Range("dPb3")(K).Value = Range("ddPb3")(I).Value
'Composition of the K-th mixture's compound
    Range("Z")(K).Value = Range("ZZ")(I).Value
  10 Next I
  ,
  End Sub
```

```
Function fun(T As Double) As Double
Dim SumXBnew As Double, I As Integer
  Tn_ = (TN + T) / 2
  Tm_ = (T1 + T) / 2
  For I = 1 To NOFC
```

```

Sn(I) = (V / L) * KV(I, P, Tn_)
Sm(I) = (Vs / Ls) * KV(I, P, Tm_)
h(I) = (KV(I, P, T) / KV(I, P, Tn_)) * (L / Ls) * _
      (1 - Sn(I)) / (1 - Sm(I))

fr(I) = ((1 - Sn(I) ^ (N - M)) + R * (1 - Sn(I))) / _
      ((1 - Sn(I) ^ (N - M)) + R * (1 - Sn(I)) + _
      h(I) * (Sn(I) ^ (N - M)) * _
      (1 - ((KV(I, P, Tm_) - 1) / (KV(I, P, Tm_) - Sm(I))) * Sm(I) ^ (M + 1)))
Next I
'New values for XB (unnormalized)
SumXBnew = 0
For I = 1 To NOFC
  XBnew(I) = fr(I) * Z(I) * Feed / B
  SumXBnew = SumXBnew + XBnew(I)
Next I

fun = SumXBnew - 1

End Function

```

```

Sub tctr1()
Dim I As Integer
'In the sheet of the column : clear the contents
Range("DistCompF").ClearContents
Range("DistCompB").ClearContents
Range("DistCompD").ClearContents
Range("DistZ").ClearContents
Range("DistXB").ClearContents
Range("DistXD").ClearContents
'Data transfer from the first run of the program
NOFC = Range("NOFC").Value
M = Range("M").Value
N = Range("N").Value
For I = 1 To NOFC
  Range("DistCompF")(I).Value = Range("Compd")(I).Value
  Range("DistCompD")(I).Value = Range("distCompF")(I).Value
  Range("DistCompB")(I).Value = Range("distCompF")(I).Value
  Range("DistZ")(I).Value = Range("Z")(I).Value
  Range("DistXB")(I).Value = Range("XB")(I, 1).Value
  Range("DistXD")(I).Value = Range("XD")(I, 1).Value
Next I
Range("DistF").Value = Range("Feed").Value
Range("Distq").Value = Range("q").Value
Range("DistP").Value = Range("P").Value
Range("DistN1_").Value = N
Range("DistM1_").Value = M

Range("DistM_1").Value = Range("M").Value + 1
Range("DistTM_1").Value = Range("Temp")(M + 1, 1).Value

Range("Distfirst").Value = 1
Range("DistT1_").Value = Range("Temp")(1, 1).Value
Range("DistN").Value = N
Range("DistTN").Value = Range("Temp")(N, 1).Value

Range("DistB").Value = Range("B")(1).Value
Range("DistTB").Value = Range("Temp")(1, 1).Value
Range("DistQr").Value = Range("Qr")(1).Value
Range("DistD").Value = Range("D")(1).Value

```

```

Range("DistTD").Value = Range("TD")(1).Value
Range("DistQc").Value = Range("Qc")(1).Value
Range("DistL").Value = Range("L").Value
Range("DistV").Value = Range("V")(1).Value
Range("DistLs").Value = Range("Ls")(1).Value
Range("DistVs").Value = Range("Vs")(1).Value
End Sub

```

Sub tcpr1()

Dim I As Integer

'In the sheet of the column : clear the contents

```

Range("DistCompF2").ClearContents
Range("DistCompB2").ClearContents
Range("DistCompD2").ClearContents
Range("DistZ2").ClearContents
Range("DistXB2").ClearContents
Range("DistXD2").ClearContents

```

'Data transfer from the first run of the program

```

NOFC = Range("NOFC").Value
M = Range("M").Value
N = Range("N").Value
For I = 1 To NOFC
    Range("DistCompF2")(I).Value = Range("Compd")(I).Value
    Range("DistCompD2")(I).Value = Range("distCompF")(I).Value
    Range("DistCompB2")(I).Value = Range("distCompF")(I).Value
    Range("DistZ2")(I).Value = Range("Z")(I).Value
    Range("DistXB2")(I).Value = Range("XB")(I, 1).Value
    Range("DistXD2")(I).Value = Range("XD")(I, 1).Value
Next I
Range("DistF2").Value = Range("Feed").Value
Range("Distq2").Value = Range("q").Value
Range("DistP2").Value = Range("P").Value
Range("DistN2_").Value = N
Range("DistM2_").Value = M

```

```

Range("DistM_12").Value = Range("M").Value + 1
Range("DistTM_12").Value = Range("Temp")(M + 1, 1).Value

```

```

Range("Distfirst2").Value = 2
Range("DistT1_2").Value = Range("Temp")(2, 1).Value
Range("DistN2").Value = N
Range("DistTN2").Value = Range("Temp")(N, 1).Value

```

```

Range("DistB2").Value = Range("B")(1).Value
Range("DistTB2").Value = Range("Temp")(1, 1).Value
Range("DistQr2").Value = Range("Qr")(1).Value
Range("DistD2").Value = Range("D")(1).Value
Range("DistTD2").Value = Range("TD")(1).Value
Range("DistQc2").Value = Range("Qc")(1).Value
Range("DistL2").Value = Range("L").Value
Range("DistV2").Value = Range("V")(1).Value
Range("DistLs2").Value = Range("Ls")(1).Value
Range("DistVs2").Value = Range("Vs")(1).Value

```

End Sub

Sub pcpr1()

Dim I As Integer

```

In the sheet of the column : clear the contents
Range("DistCompF3").ClearContents
Range("DistCompB3").ClearContents
Range("DistCompD3").ClearContents
Range("DistZ3").ClearContents
Range("DistXB3").ClearContents
Range("DistXD3").ClearContents
'Data transfer from the first run of the program
NOFC = Range("NOFC").Value
M = Range("M").Value
N = Range("N").Value
For I = 1 To NOFC
    Range("DistCompF3")(I).Value = Range("Compd")(I).Value
    Range("DistCompD3")(I).Value = Range("distCompF")(I).Value
    Range("DistCompB3")(I).Value = Range("distCompF")(I).Value
    Range("DistZ3")(I).Value = Range("Z")(I).Value
    Range("DistXB3")(I).Value = Range("XB")(I, 1).Value
    Range("DistXD3")(I).Value = Range("XD")(I, 1).Value
Next I
Range("DistF3").Value = Range("Feed").Value
Range("Distq3").Value = Range("q").Value
Range("DistP3").Value = Range("P").Value
Range("DistN3_").Value = N
Range("DistM3_").Value = M

Range("DistM_13").Value = Range("M").Value + 1
Range("DistTM_13").Value = Range("Temp")(M + 1, 1).Value

Range("Distfirst3").Value = 2
Range("DistT1_3").Value = Range("Temp")(2, 1).Value
Range("DistN3").Value = N - 1
Range("DistTN3").Value = Range("Temp")(N - 1, 1).Value

Range("DistB3").Value = Range("B")(1).Value
Range("DistTB3").Value = Range("Temp")(1, 1).Value
Range("DistQr3").Value = Range("Qr")(1).Value
Range("DistD3").Value = Range("D")(1).Value
Range("DistTD3").Value = Range("TD")(1).Value
Range("DistQc3").Value = Range("Qc")(1).Value
Range("DistL3").Value = Range("L").Value
Range("DistV3").Value = Range("V")(1).Value
Range("DistLs3").Value = Range("Ls")(1).Value
Range("DistVs3").Value = Range("Vs")(1).Value
End Sub

```

Sub pctr1()

Dim I As Integer

```

In the sheet of the column : clear the contents
Range("DistCompF4").ClearContents
Range("DistCompB4").ClearContents
Range("DistCompD4").ClearContents
Range("DistZ4").ClearContents
Range("DistXB4").ClearContents
Range("DistXD4").ClearContents
'Data transfer from the first run of the program
NOFC = Range("NOFC").Value
M = Range("M").Value
N = Range("N").Value
For I = 1 To NOFC
    Range("DistCompF4")(I).Value = Range("Compd")(I).Value

```

```

Range("DistCompD4")(I).Value = Range("distCompF")(I).Value
Range("DistCompB4")(I).Value = Range("distCompF")(I).Value
Range("DistZ4")(I).Value = Range("Z")(I).Value
Range("DistXB4")(I).Value = Range("XB")(I, 1).Value
Range("DistXD4")(I).Value = Range("XD")(I, 1).Value
Next I
Range("DistF4").Value = Range("Feed").Value
Range("Distq4").Value = Range("q").Value
Range("DistP4").Value = Range("P").Value
Range("DistN4_").Value = N
Range("DistM4_").Value = M

Range("DistM_14").Value = Range("M").Value + 1
Range("DistTM_14").Value = Range("Temp")(M + 1, 1).Value

Range("Distfirst4").Value = 1
Range("DistT1_4").Value = Range("Temp")(1, 1).Value
Range("DistN4").Value = N - 1
Range("DistTN4").Value = Range("Temp")(N - 1, 1).Value

Range("DistB4").Value = Range("B")(1).Value
Range("DistTB4").Value = Range("Temp")(1, 1).Value
Range("DistQr4").Value = Range("Qr")(1).Value
Range("DistD4").Value = Range("D")(1).Value
Range("DistTD4").Value = Range("TD")(1).Value
Range("DistQc4").Value = Range("Qc")(1).Value
Range("DistL4").Value = Range("L").Value
Range("DistV4").Value = Range("V")(1).Value
Range("DistLs4").Value = Range("Ls")(1).Value
Range("DistVs4").Value = Range("Vs")(1).Value
End Sub

```

MODULE 1

'Module in which functions calculating
Kvalues, TPD and TBP are included.
Option Private Module
Option Base 1
Option Explicit

```

Public Function KV(NC As Integer, P As Double, T As Double) As Double
Dim PkPa As Double
'P in atms --> P in kPa
PkPa = 1.0132 * 100 * P
KV = Exp((dPa1(NC) / T ^ 2) + (dPa2(NC) / T) + dPa3(NC) + _
(dPb1(NC) * Log(PkPa)) + (dPb2(NC) / PkPa ^ 2) + _
(dPb3(NC) / PkPa))
End Function

```

```

'Function dKV
Public Function dKV(NC As Integer, P As Double, T As Double) As Double
dKV = KV(NC, P, T) * ((-2) * dPa1(NC) / T ^ 3 + (-1) * dPa2(NC) / T ^ 2)
End Function

```

```
'Function TDP
'Calculates Dew point temperature using Newton
'Raphson method
  Public Function TDP(Y() As Double, P As Double) As Double
  Dim Tstart As Double, Tfinal As Double
'Initial value for TDP in Kelvins
  Tstart = Range("TDPstart").Value
  Call Newton1(Y(), P, Tstart, Tfinal)
  TDP = Tfinal
End Function
```

```
'Function TBP
'Calculates Bubble point temperature using Newton
'Raphson method
  Public Function TBP(X() As Double, P As Double) As Double
  Dim Tstart As Double, Tfinal As Double
'Initial value for TDP in Kelvins
  Tstart = Range("TBPstart").Value
  Call Newton2(X(), P, Tstart, Tfinal)
  TBP = Tfinal
End Function
```

```
'Sub Newton1
'It is the Newton Raphson method
  Private Sub Newton1(Y() As Double, P As Double, startx As Double, _
    finalx As Double)
  Dim TOL As Double, nmax As Integer, N As Integer, XN As Double, _
    Xn1 As Double
'Tol = tolerance
  TOL = 0.0001
'nmax = maximum number of iterations
  nmax = 20
  N = 0
  XN = startx
5    If N >= nmax Then GoTo 10
      N = N + 1
      Xn1 = XN - g(Y(), P, XN) / dg(Y(), P, XN)
      If Abs((Xn1 - XN) / XN) >= TOL Then
        XN = Xn1
        GoTo 5
      End If
10   finalx = Xn1
End Sub
```

```
Private Function g(Y() As Double, P As Double, T As Double) As Double
Dim sumg As Double, I As Integer
  sumg = 0
  For I = 1 To NOFC
    sumg = sumg + Y(I) / KV(I, P, T)
  Next I
  g = sumg - 1
End Function
```

Private Function dg(Y) As Double, P As Double, T As Double) As Double

```
Dim sumdg As Double, I As Integer
sumdg = 0
For I = 1 To NOFC
    sumdg = sumdg - Y(I) * dKV(I, P, T) / (KV(I, P, T) ^ 2)
Next I
dg = sumdg
End Function
```

'Sub Newton2

'It is the Newton Raphson method

**Private Sub Newton2(X() As Double, P As Double, startx As Double, _
finalx As Double)**

```
Dim TOL As Double, nmax As Integer, N As Integer, XN As Double, _  
Xn1 As Double
```

'Tol = tolerance

```
TOL = 0.0001
```

'nmax = maximum number of iterations

```
nmax = 20
```

```
N = 0
```

```
XN = startx
```

5 If N >= nmax Then GoTo 10

```
    N = N + 1
```

```
    Xn1 = XN - f(X(), P, XN) / df(X(), P, XN)
```

```
    If Abs((Xn1 - XN) / XN) >= TOL Then
```

```
        XN = Xn1
```

```
        GoTo 5
```

```
    End If
```

10 finalx = Xn1

```
End Sub
```

Private Function f(X() As Double, P As Double, T As Double) As Double

```
Dim sumf As Double, I As Integer
```

```
sumf = 0
```

```
For I = 1 To NOFC
```

```
    sumf = sumf + X(I) * KV(I, P, T)
```

```
Next I
```

```
f = 1 - sumf
```

```
End Function
```

Private Function df(X() As Double, P As Double, T As Double) As Double

```
Dim Tfar As Double, sumdf As Double, I As Integer
```

```
sumdf = 0
```

```
For I = 1 To NOFC
```

```
    sumdf = sumdf - X(I) * dKV(I, P, T)
```

```
Next I
```

```
df = sumdf
```

```
End Function
```

MODULE 2

```
'Module in which functions calculating
'molar enthalpies are included [hvo1,hvo2,hmv,hml,lamda].
  Option Private Module
  Option Base 1
  Option Explicit
```

```
*****
```

```
'function hvo
'Enthalpy value for each compound (as ideal gas),T in K
  Public Function hvo(NC As Integer, T As Double) As Double
  Dim Tfaro As Double, Tfar As Double
'Tfar temperature in fahrenheit
  Tfaro = 1.8 * T - 459.67
'Reference Temperature in F
'Tfaro = 0
  Tfaro = 1.8 * 273.15 - 459.67
'hvo in j/mole
  hvo = (ac1(NC) * (Tfar - Tfaro)) +
    (ac2(NC) / 2) * (Tfar ^ 2 - Tfaro ^ 2) +
    (ac3(NC) / 3) * (Tfar ^ 3 - Tfaro ^ 3) +
    (ac4(NC) / 4) * (Tfar ^ 4 - Tfaro ^ 4) +
    (ac5(NC) / 5) * (Tfar ^ 5 - Tfaro ^ 5)
'hv in j/mole --> hv in Mj/kmole
  hvo = hvo / 1000
End Function
```

```
*****
```

```
'Function hmv
'Enthalpy value for mixture of compounds (vapor phase), T in K
  Public Function hmv(X) As Double, T As Double) As Double
  Dim sumhmv As Double, I As Integer
'hmv in MJ/kmole
  sumhmv = 0
  For I = 1 To NOFC
    sumhmv = sumhmv + X(I) * hvo(I, T)
  Next I
  hmv = sumhmv
End Function
```

```
*****
```

```
'Function hml
'Enthalpy value for mixture of compounds(liquid phase), T in K
'lamda = molar heat of vaporization
  Public Function hml(X) As Double, T As Double) As Double
  Dim sumhml As Double, I As Integer
'hml in MJ/kmole
  sumhml = 0
  For I = 1 To NOFC
    sumhml = sumhml + X(I) * (hvo(I, T) - lamda(I, T))
  Next I
  hml = sumhml
End Function
```

```
*****
```

```
'Function lamda
'Calculates the heat of vaporization for a compound,T in K
  Function lamda(NC As Integer, T As Double) As Double
```

```

Dim Rg As Double
'R = 8.3144 j/(mole K)
  Rg = 8.3144
'lamda in j/mole
  lamda = A2(NC) * Rg * (T ^ 2) / (T + A3(NC)) ^ 2
'lamda in j/mole --> lamda in MJ/kmole
  lamda = lamda / 1000
End Function

*****

```

2ο μέρος του κώδικα :

MODULE DIAGSUB

```

Option Private Module
Option Base 1
Option Explicit

```

```

*****

```

Sub data1()

```

DialogSheets("Dialog1").EditBoxes("F_").Text = Range("Feed").Value
DialogSheets("Dialog1").EditBoxes("D_").Text = Range("D").Value
DialogSheets("Dialog1").EditBoxes("L_").Text = Range("L").Value
DialogSheets("Dialog1").EditBoxes("P_").Text = Range("P").Value
DialogSheets("Dialog1").EditBoxes("q_").Text = Range("q").Value
DialogSheets("Dialog1").EditBoxes("N_").Text = Range("N").Value
DialogSheets("Dialog1").EditBoxes("M_").Text = Range("M").Value
DialogSheets("Dialog1").EditBoxes("NOFC_").Text = Range("NOFC").Value

```

```

Range("Feedh").Value = DialogSheets("Dialog1").EditBoxes("F_").Text
Range("Dh").Value = DialogSheets("Dialog1").EditBoxes("D_").Text
Range("Lh").Value = DialogSheets("Dialog1").EditBoxes("L_").Text
Range("Ph").Value = DialogSheets("Dialog1").EditBoxes("P_").Text
Range("qh").Value = DialogSheets("Dialog1").EditBoxes("q_").Text
Range("Nh").Value = DialogSheets("Dialog1").EditBoxes("N_").Text
Range("Mh").Value = DialogSheets("Dialog1").EditBoxes("M_").Text

```

```

If DialogSheets("Dialog1").Show Then
Range("Feedh").Value = DialogSheets("Dialog1").EditBoxes("F_").Text
Range("FeedCV").Value = (Range("Feedh").Value _
  - Range("Feedmin").Value) * 100 / _
  (Range("Feedmax").Value - Range("Feedmin").Value)

```

```

Range("Dh").Value = DialogSheets("Dialog1").EditBoxes("D_").Text
Range("DCV").Value = (Range("Dh").Value _
  - Range("Dmin").Value) * 100 / _
  (Range("Dmax").Value - Range("Dmin").Value)

```

```

Range("Lh").Value = DialogSheets("Dialog1").EditBoxes("L_").Text
Range("LCV").Value = (Range("Lh").Value _
  - Range("Lmin").Value) * 100 / _

```

```

        (Range("Lmax").Value - Range("Lmin").Value)

Range("Ph").Value = DialogSheets("Dialog1").EditBoxes("P_").Text
Range("PCV").Value = (Range("Ph").Value _
    - Range("Pmin").Value) * 100 / _
    (Range("Pmax").Value - Range("Pmin").Value)

Range("qh").Value = DialogSheets("Dialog1").EditBoxes("q_").Text
Range("qCV").Value = (Range("qh").Value _
    - Range("qmin").Value) * 100 / _
    (Range("qmax").Value - Range("qmin").Value)

Range("Nh").Value = DialogSheets("Dialog1").EditBoxes("N_").Text
Range("NCV").Value = (Range("Nh").Value _
    - Range("Nmin").Value) * 100 / _
    (Range("Nmax").Value - Range("Nmin").Value)

Range("Mh").Value = DialogSheets("Dialog1").EditBoxes("M_").Text
Range("MCV").Value = (Range("Mh").Value _
    - Range("Mmin").Value) * 100 / _
    (Range("Mmax").Value - Range("Mmin").Value)

Range("NOFC").Value = DialogSheets("Dialog1").EditBoxes("NOFC_").Text
End If
Beep
End Sub

```

Sub data2()

```

DialogSheets("Dialog2").EditBoxes("Z1_").Text = Range("ZZ")(1).Value
DialogSheets("Dialog2").EditBoxes("Z2_").Text = Range("ZZ")(2).Value
DialogSheets("Dialog2").EditBoxes("Z3_").Text = Range("ZZ")(3).Value
DialogSheets("Dialog2").EditBoxes("Z4_").Text = Range("ZZ")(4).Value
DialogSheets("Dialog2").EditBoxes("Z5_").Text = Range("ZZ")(5).Value
DialogSheets("Dialog2").EditBoxes("Z6_").Text = Range("ZZ")(6).Value
DialogSheets("Dialog2").EditBoxes("Z7_").Text = Range("ZZ")(7).Value
DialogSheets("Dialog2").EditBoxes("Z8_").Text = Range("ZZ")(8).Value
DialogSheets("Dialog2").EditBoxes("Z9_").Text = Range("ZZ")(9).Value
DialogSheets("Dialog2").EditBoxes("Z10_").Text = Range("ZZ")(10).Value
DialogSheets("Dialog2").EditBoxes("Z11_").Text = Range("ZZ")(11).Value
DialogSheets("Dialog2").EditBoxes("Z12_").Text = Range("ZZ")(12).Value
DialogSheets("Dialog2").EditBoxes("Z13_").Text = Range("ZZ")(13).Value
DialogSheets("Dialog2").EditBoxes("Z14_").Text = Range("ZZ")(14).Value

```

```

If DialogSheets("Dialog2").Show Then
Range("ZZ")(1).Value = DialogSheets("Dialog2").EditBoxes("Z1_").Text
Range("ZZ")(2).Value = DialogSheets("Dialog2").EditBoxes("Z2_").Text
Range("ZZ")(3).Value = DialogSheets("Dialog2").EditBoxes("Z3_").Text
Range("ZZ")(4).Value = DialogSheets("Dialog2").EditBoxes("Z4_").Text
Range("ZZ")(5).Value = DialogSheets("Dialog2").EditBoxes("Z5_").Text
Range("ZZ")(6).Value = DialogSheets("Dialog2").EditBoxes("Z6_").Text
Range("ZZ")(7).Value = DialogSheets("Dialog2").EditBoxes("Z7_").Text
Range("ZZ")(8).Value = DialogSheets("Dialog2").EditBoxes("Z8_").Text
Range("ZZ")(9).Value = DialogSheets("Dialog2").EditBoxes("Z9_").Text
Range("ZZ")(10).Value = DialogSheets("Dialog2").EditBoxes("Z10_").Text
Range("ZZ")(11).Value = DialogSheets("Dialog2").EditBoxes("Z11_").Text
Range("ZZ")(12).Value = DialogSheets("Dialog2").EditBoxes("Z12_").Text
Range("ZZ")(13).Value = DialogSheets("Dialog2").EditBoxes("Z13_").Text
Range("ZZ")(14).Value = DialogSheets("Dialog2").EditBoxes("Z14_").Text
End If
Beep

```

End Sub

Sub independent()

DialogSheets("Dialog3").EditBoxes("MinVal_").Text = Range("MinVal").Value
DialogSheets("Dialog3").EditBoxes("MaxVal_").Text = Range("MaxVal").Value
DialogSheets("Dialog3").EditBoxes("NofP_").Text = Range("NofP").Value

If DialogSheets("Dialog3").Show Then
Range("MinVal").Value = DialogSheets("Dialog3").EditBoxes("MinVal_").Text
Range("MaxVal").Value = DialogSheets("Dialog3").EditBoxes("MaxVal_").Text
Range("NofP").Value = DialogSheets("Dialog3").EditBoxes("NofP_").Text
End If
Beep
End Sub

Sub dependent()

DialogSheets("Dialog4").EditBoxes("NC_").Text = Range("NC").Value
DialogSheets("Dialog4").EditBoxes("NT1_").Text = Range("NT1").Value
DialogSheets("Dialog4").EditBoxes("NX1_").Text = Range("NX1").Value

Rem

If DialogSheets("Dialog4").Show Then
Range("NC").Value = DialogSheets("Dialog4").EditBoxes("NC_").Text
Range("NT1").Value = DialogSheets("Dialog4").EditBoxes("NT1_").Text
Range("NX1").Value = DialogSheets("Dialog4").EditBoxes("NX1_").Text
End If
Beep
End Sub

Sub simple()

DialogSheets("Dialog5").Show
Beep
End Sub

MODULE CHARTSIMPLE

Option Private Module
Option Base 1
Option Explicit

Public Sub Make_Chart_of_the_Simple_Solution()

Application.ScreenUpdating = False

'Make the chart if it does not exist. Status = 0 means that the chart
'does not exist

If Range("Control!StatusDiag").Value = 0 Then

'Useful values from the sheet

NOFC = Range("Database!NOFC").Value

N = Range("N").Value

'Make the chart

```

Sheets("Control").Activate
If Range("Control!StatusZBD").Value = True Then
    Call Make_ZBD_Chart
End If

Sheets("Control").Activate
If Range("Control!Statusfr").Value = True Then
    Call Make_f_Chart
End If

Sheets("Control").Activate
If Range("Control!StatusXN").Value = True Then
    Call Make_XN_Chart
End If

Sheets("Control").Activate
If Range("Control!StatusTN").Value = True Then
    Call Make_TN_Chart
End If
'Cut and paste the chart
Sheets("Results").Activate
ActiveSheet.ChartObjects(1).Select
Selection.Cut
Sheets("Control").Select
Range("B7").Select
ActiveSheet.Paste
ActiveSheet.ChartObjects(1).Select
    With Selection
        .Left = 70
        .Top = 33
        .Height = 243.5
        .Width = 362.5
    End With
    ActiveSheet.ChartObjects(1).Activate
    ActiveChart.ChartTitle.Select
    Selection.Font.Bold = True

ActiveSheet.ChartObjects(1).Activate
ActiveChart.PlotArea.Select
ActiveChart.Deselect
ActiveWindow.Visible = False
Range("A1").Select

Range("Control!StatusDiag").Value = 1
Else
'Delete the chart if it exists Status = 1 means that the chart exists
Sheets("Control").Activate
ActiveSheet.ChartObjects(1).Select
Selection.Delete
Range("Control!StatusDiag").Value = 0
End If

Application.ScreenUpdating = False

Beep
'
End Sub

*****

Public Sub Make_ZBD_Chart()

```

```

Sheets("Results").Activate
ActiveSheet.ChartObjects.add(0, 265.8, 415, 196.2).Select
Application.CutCopyMode = False
ActiveChart.ChartWizard Source:= _
Range("index(Compd,1):index(Compd,index(NOFC,1)),index(Z,1):index(Z,index(NOFC,1)),index(XB,1,index(
COUNTER1,1)):index(XB,index(NOFC,1),index(COUNTER1,1)),index(XD,1,index(COUNTER1,1)):index(X
D,index(NOFC,1),index(COUNTER1,1))", _
    Gallery:=xlBar, Format:=6, PlotBy:=xlColumns, CategoryLabels _
    :=1, SeriesLabels:=0, HasLegend:=1, Title:="Γραμμομοριακά κλάσματα συστατικών", CategoryTitle
    :="", ValueTitle:="", ExtraTitle:=""
Name the series
ActiveChart.SeriesCollection(1).Name = "Z"
ActiveChart.SeriesCollection(2).Name = "XB"
ActiveChart.SeriesCollection(3).Name = "XD"
Form of the chart
ActiveSheet.ChartObjects(1).Activate
ActiveChart.ChartArea.Select

With Selection.Font
    .Name = "Times New Roman Greek"
    .FontStyle = "Regular"
    .Size = 8
    .Strikethrough = False
    .Superscript = False
    .Subscript = False
    .OutlineFont = False
    .Shadow = False
    .Underline = xlNone
    .ColorIndex = xlAutomatic
    .Background = xlAutomatic
End With

ActiveChart.PlotArea.Select
With Selection
    .Width = 380
    .Height = 33.3 * NOFC
    .Left = 1
    .Top = 20
End With

With Selection.Interior
    .ColorIndex = 2
    .Pattern = xlSolid
End With

With ActiveChart.Axes(xlValue)
    .TickLabels.NumberFormat = "0.00"
End With

End Sub

```

Public Sub Make_f_Chart()

```

Sheets("Results").Activate
ActiveSheet.ChartObjects.add(0, 265.8, 415, 196.2).Select
Application.CutCopyMode = False
ActiveChart.ChartWizard Source:= _
Range("index(Compd,1):index(Compd,index(NOFC,1)),index(f,1,index(COUNTER1,1)):index(f,index(NOFC,
1),index(COUNTER1,1)),index(fd,1,index(COUNTER1,1)):index(fd,index(NOFC,1),index(COUNTER1,1))",

```

—

```

Gallery:=xlBar, Format:=5, PlotBy:=xlColumns, CategoryLabels _
:=1, SeriesLabels:=0, HasLegend:=1, Title:="Ανακτήσεις συστατικών", CategoryTitle _
:= "", ValueTitle:= "", ExtraTitle:= ""
'Name the series
ActiveChart.SeriesCollection(1).Name = "in B"
ActiveChart.SeriesCollection(2).Name = "in D"
'Form of the chart
ActiveSheet.ChartObjects(1).Activate
ActiveChart.ChartArea.Select

With Selection.Font
.Name = "Times New Roman Greek"
.FontStyle = "Regular"
.Size = 8
.Strikethrough = False
.Superscript = False
.Subscript = False
.OutlineFont = False
.Shadow = False
.Underline = xlNone
.ColorIndex = xlAutomatic
.Background = xlAutomatic
End With

ActiveChart.PlotArea.Select
With Selection
.Width = 380
.Height = 33.3 * NOFC
.Left = 1
.Top = 20
End With

With Selection.Interior
.ColorIndex = 2
.Pattern = xlSolid
End With

End Sub

```

Public Sub Make_XN_Chart()

Dim I As Integer, Compd(14) As Variant

For I = 1 To NOFC

Compd(I) = Range("Compd")(I).Value

Next I

Sheets("Results").Activate

ActiveSheet.ChartObjects.add(0, 265.8, 415, 196.2).Select

Application.CutCopyMode = False

ActiveChart.ChartWizard Source:= _

Range("A1"), _

Gallery:=xlXYScatter, Format:=2, PlotBy:=xlColumns, CategoryLabels _

:=1, SeriesLabels:=0, HasLegend:=1, Title:= "", _

CategoryTitle:= "", ValueTitle:= "N", ExtraTitle:= ""

For I = 1 To NOFC

Sheets("Results").Activate

Range("Cmincur").Value = Range("Cmin")(I).Value

Range("Cmaxcur").Value = Range("Cmax")(I).Value


```

ActiveSheet.ChartObjects(1).Activate
ActiveChart.SeriesCollection.add _

Source:="index(XL,index(Cmincur,1),index(COUNTER1,1)):index(XL,index(Cmaxcur,1),index(COUNTER1,
1)),index(NXar,index(Cmincur,1)):index(NXar,index(Cmaxcur,1))", _
Rowcol:=xlColumns, SeriesLabels:=0, CategoryLabels:=True, _
Replace:=False
ActiveChart.SeriesCollection(I).Name = Compd(I)
ActiveChart.SeriesCollection(I).Select
With Selection
.MarkerBackgroundColorIndex = xlNone
.Smooth = True
End With

Next I
'Form of the chart
Sheets("Results").Activate
ActiveSheet.ChartObjects(1).Activate

With ActiveChart
.HasTitle = True
.Axes(xlCategory, xlPrimary).HasTitle = False
.Axes(xlValue, xlPrimary).HasTitle = True
End With

ActiveChart.ChartArea.Select
ActiveChart.Axes(xlValue).AxisTitle.Select
With Selection
.HorizontalAlignment = xlCenter
.VerticalAlignment = xlCenter
.Orientation = xlHorizontal
.Characters.Text = "N"
End With

Sheets("Results").Activate
ActiveSheet.ChartObjects(1).Activate
ActiveChart.ChartTitle.Select
Selection.Characters.Text = "Σύσταση υγρής φάσης ανά βαθμίδα"

ActiveChart.ChartArea.Select

With Selection.Font
.Name = "Times New Roman Greek"
.FontStyle = "Regular"
.Size = 8
.Strikethrough = False
.Superscript = False
.Subscript = False
.OutlineFont = False
.Shadow = False
.Underline = xlNone
.ColorIndex = xlAutomatic
.Background = xlAutomatic
End With

ActiveChart.PlotArea.Select
With Selection
.Width = 324
.Height = 200
.Left = 24
.Top = 20
End With

```

```

With Selection.Border
    .ColorIndex = 16
    .Weight = xlThin
    .LineStyle = xlContinuous
End With

```

```

With Selection.Interior
    .ColorIndex = 2
    .Pattern = xlSolid
End With

```

```

With ActiveChart.Axes(xlCategory)
    .HasMajorGridlines = True
    .HasMinorGridlines = False
    .TickLabels.NumberFormat = "0.00"
End With

```

```

With ActiveChart.Axes(xlValue)
    .HasMajorGridlines = True
    .HasMinorGridlines = False
End With

```

```

ActiveChart.Axes(xlValue).MajorGridlines.Select
With Selection.Border
    .ColorIndex = 16
    .Weight = xlHairline
    .LineStyle = xlContinuous
End With

```

```

ActiveChart.Axes(xlCategory).MajorGridlines.Select
With Selection.Border
    .ColorIndex = 16
    .Weight = xlHairline
    .LineStyle = xlContinuous
End With

```

```

ActiveChart.Axes(xlValue).Select
With ActiveChart.Axes(xlValue)
    .MinimumScale = 1
    .MaximumScale = N
    .MinorUnitIsAuto = True
    .MajorUnitIsAuto = True
    .Crosses = xlAutomatic
    .ReversePlotOrder = False
    .ScaleType = False
End With

```

```
End Sub
```

```
*****
```

Public Sub Make_TN_Chart()

```

    Sheets("Results").Activate
    ActiveSheet.ChartObjects.add(0, 265.8, 415, 196.2).Select
    Application.CutCopyMode = False
        ActiveChart.ChartWizardSource:=
Range("index(Temp,index(Cmin,1),index(COUNTER1,1)):index(Temp,index(Cmax,1),index(COUNTER1,1)),i
ndex(NTar,index(Cmin,1)):index(NTar,index(Cmax,1)))", _
    Gallery:=xlXYScatter, Format:=2, PlotBy:=xlColumns, CategoryLabels _
:=1, SeriesLabels:=0, HasLegend:=1, Title:="", _
    CategoryTitle:="", ValueTitle:="N", ExtraTitle:=""

```

```

Form of the chart
    Sheets("Results").Activate
    ActiveSheet.ChartObjects(1).Activate

With ActiveChart
    .HasTitle = True
    .Axes(xlCategory, xlPrimary).HasTitle = True
    .Axes(xlValue, xlPrimary).HasTitle = True
End With

ActiveChart.ChartArea.Select
ActiveChart.Axes(xlValue).AxisTitle.Select
With Selection
    .HorizontalAlignment = xlCenter
    .VerticalAlignment = xlCenter
    .Orientation = xlHorizontal
    .Characters.Text = "N"
End With

ActiveChart.ChartArea.Select
ActiveChart.Axes(xlCategory).AxisTitle.Select
With Selection
    .HorizontalAlignment = xlCenter
    .VerticalAlignment = xlCenter
    .Orientation = xlHorizontal
    .Characters.Text = "T (K)"
End With

    Sheets("Results").Activate
    ActiveSheet.ChartObjects(1).Activate
    ActiveChart.ChartTitle.Select
    Selection.Characters.Text = "Θερμοκρασία ανά βαθμίδα"

    ActiveChart.ChartArea.Select

With Selection.Font
    .Name = "Times New Roman Greek"
    .FontStyle = "Regular"
    .Size = 8
    .Strikethrough = False
    .Superscript = False
    .Subscript = False
    .OutlineFont = False
    .Shadow = False
    .Underline = xlNone
    .ColorIndex = xlAutomatic
    .Background = xlAutomatic
End With

ActiveChart.PlotArea.Select
With Selection
    .Width = 370
    .Height = 200
    .Left = 24
    .Top = 20
End With

With Selection.Border
    .ColorIndex = 16
    .Weight = xlThin
    .LineStyle = xlContinuous
End With

```

```
With Selection.Interior
    .ColorIndex = 2
    .Pattern = xlSolid
End With
```

```
With ActiveChart.Axes(xlCategory)
    .HasMajorGridlines = True
    .HasMinorGridlines = False
End With
```

```
With ActiveChart.Axes(xlValue)
    .HasMajorGridlines = True
    .HasMinorGridlines = False
End With
```

```
ActiveChart.Axes(xlValue).MajorGridlines.Select
With Selection.Border
    .ColorIndex = 16
    .Weight = xlHairline
    .LineStyle = xlContinuous
End With
```

```
ActiveChart.Axes(xlCategory).MajorGridlines.Select
With Selection.Border
    .ColorIndex = 16
    .Weight = xlHairline
    .LineStyle = xlContinuous
End With
```

```
ActiveChart.Axes(xlValue).Select
With ActiveChart.Axes(xlValue)
    .MinimumScale = 1
    .MaximumScale = N
    .MinorUnitIsAuto = True
    .MajorUnitIsAuto = True
    .Crosses = xlAutomatic
    .ReversePlotOrder = False
    .ScaleType = False
End With
```

```
ActiveChart.Legend.Select
Selection.Delete
```

```
    ActiveChart.SeriesCollection(1).Select
With Selection
    .MarkerBackgroundColorIndex = xlNone
    .Smooth = True
End With
```

```
End Sub
```

```
*****
```

MODULE CHARTMULTIPLE

```
Option Private Module
Option Base 1
Option Explicit
```

```
*****
```

Public Sub Make_Chart_of_the_Multiple_Solution()

```
Dim Nofseries As Integer, NC As Integer, NT1 As Variant, NX1 As Variant, _
    I As Integer, J As Integer, K As Integer, KKK As Integer, _
    onomaTitle As Variant, onomaY As Variant, indep(20) As Variant, _
    PosinXL As Integer, NTmax As Integer

Application.ScreenUpdating = False

Nofseries = 0
'Make the chart if it does not exist. Status = 0 means that the chart
'does not exist
    If Range("Control!StatusDiag").Value = 0 Then
'Make the chart from the sheet
        N = Range("Database!N").Value
        NOFC = Range("Database!NOFC").Value
        NofP = Range("Control!NofP").Value
        MinVal = Range("Control!MinVal").Value
        MaxVal = Range("Control!MaxVal").Value
        NC = Range("Control!NC").Value
        NT1 = Range("Control!NT1").Value
        NX1 = Range("Control!NX1").Value

        onomaY = Range("Results!name").Value
        onomaTitle = Range("Results!Compd")(NC).Value

        For J = 1 To NofP
            indep(J) = Range("Results!indep")(J).Value
        Next J
'Make the chart
        Sheets("Results").Activate
        ActiveSheet.ChartObjects.add(0, 265.8, 415, 196.2).Select
        Application.CutCopyMode = False
        ActiveChart.ChartWizard Source:= _
        Range("A1"), _
        Gallery:=xlXYScatter, Format:=2, PlotBy:=xlRows, CategoryLabels:=1, _
        SeriesLabels:=0, HasLegend:=1, Title:= " ", _
        CategoryTitle:= " ", _
        ValueTitle:= "", ExtraTitle:= ""
'Make the chart
        'Which are the Series of Temperature (Temperature set in one dimension)
        'in the diagram
            If Range("Control!StatusTD").Value = True Or _
                Range("Control!StatusTB").Value = True Or _
                Range("Control!StatusNT1").Value = True Then
'Make the chart
                ' Is TD in the diagram ?
                Sheets("Control").Activate
                If Range("Control!StatusTD").Value = True Then

                    Nofseries = Nofseries + 1

                    Sheets("Results").Activate
                    ActiveSheet.ChartObjects(1).Activate
                    ActiveChart.SeriesCollection.add Source:= _
                    "index(TD,1):index(TD,NofP),index(indep,1):index(indep,NofP)", _
                    Rowcol:=xlRows, SeriesLabels:=0, CategoryLabels:=True, _
                    Replace:=False

                    With ActiveChart.SeriesCollection(Nofseries)
                        .Name = "TD (K)"
                    End With
                End If
            End If
        ' Is TB (or T1_) in the diagram ?
```

```

Sheets("Control").Activate
If Range("Control!StatusTB").Value = True Then

    Nofseries = Nofseries + 1

    Sheets("Results").Activate
    ActiveSheet.ChartObjects(1).Activate
    ActiveChart.SeriesCollection.add Source:= _
    "index(T1_,1):index(T1_,NofP),index(indep,1):index(indep,NofP)", _
    Rowcol:=xlRows, SeriesLabels:=0, CategoryLabels:=True, _
    Replace:=False

    With ActiveChart.SeriesCollection(Nofseries)
        .Name = "TB (K)"
    End With

End If

' Is T(NT1) in the diagram ?
    Sheets("Control").Activate
    If Range("Control!StatusNT1").Value = True Then

        Nofseries = Nofseries + 1

        Sheets("Results").Activate
        ActiveSheet.ChartObjects(1).Activate
        ActiveChart.SeriesCollection.add Source:= _
        "index(Temp,NT1,1):index(Temp,NT1,NofP),index(indep,1):index(indep,NofP)", _
        Rowcol:=xlRows, SeriesLabels:=0, CategoryLabels:=True, _
        Replace:=False

        With ActiveChart.SeriesCollection(Nofseries)
            .Name = NT1
        End With

    End If
    GoTo 10
End If
'Which are the Series of flow rate (flow rate set in one dimension)
'in the diagram
    If Range("Control!StatusV").Value = True Or _
    Range("Control!StatusLs").Value = True Or _
    Range("Control!StatusVs").Value = True Or _
    Range("Control!StatusB").Value = True Then

' Is V in the diagram ?
    Sheets("Control").Activate
    If Range("Control!StatusV").Value = True Then

        Nofseries = Nofseries + 1

        Sheets("Results").Activate
        ActiveSheet.ChartObjects(1).Activate
        ActiveChart.SeriesCollection.add Source:= _
        "index(V,1):index(V,NofP),index(indep,1):index(indep,NofP)", _
        Rowcol:=xlRows, SeriesLabels:=0, CategoryLabels:=True, _
        Replace:=False

        With ActiveChart.SeriesCollection(Nofseries)
            .Name = "V (kmol/h)"
        End With

    End If

```

```

' Is L' in the diagram ?
  Sheets("Control").Activate
  If Range("Control!StatusLs").Value = True Then

    Nofseries = Nofseries + 1

    Sheets("Results").Activate
    ActiveSheet.ChartObjects(1).Activate
    ActiveChart.SeriesCollection.add Source:= _
    "index(Ls,1):index(Ls,NofP),index(indep,1):index(indep,NofP)", _
    Rowcol:=xlRows, SeriesLabels:=0, CategoryLabels:=True, _
    Replace:=False

    With ActiveChart.SeriesCollection(Nofseries)
      .Name = "L' (kmol/h)"
    End With

  End If

' Is V' in the diagram ?
  Sheets("Control").Activate
  If Range("Control!StatusVs").Value = True Then

    Nofseries = Nofseries + 1

    Sheets("Results").Activate
    ActiveSheet.ChartObjects(1).Activate
    ActiveChart.SeriesCollection.add Source:= _
    "index(Vs,1):index(Vs,NofP),index(indep,1):index(indep,NofP)", _
    Rowcol:=xlRows, SeriesLabels:=0, CategoryLabels:=True, _
    Replace:=False

    With ActiveChart.SeriesCollection(Nofseries)
      .Name = "V' (kmol/h)"
    End With

  End If

' Is B in the diagram ?
  Sheets("Control").Activate
  If Range("Control!StatusB").Value = True Then

    Nofseries = Nofseries + 1

    Sheets("Results").Activate
    ActiveSheet.ChartObjects(1).Activate
    ActiveChart.SeriesCollection.add Source:= _
    "index(B,1):index(B,NofP),index(indep,1):index(indep,NofP)", _
    Rowcol:=xlRows, SeriesLabels:=0, CategoryLabels:=True, _
    Replace:=False

    With ActiveChart.SeriesCollection(Nofseries)
      .Name = "B (kmol/h)"
    End With

  End If

  GoTo 10
End If
'Which are the Series of Load (Load set in one dimension)
'in the diagram

```

```

        If Range("Control!StatusQr").Value = True Or _
            Range("Control!StatusQc").Value = True Then

' Is Qr in the diagram ?
    Sheets("Control").Activate
    If Range("Control!StatusQr").Value = True Then

        Nofseries = Nofseries + 1

        Sheets("Results").Activate
        ActiveSheet.ChartObjects(1).Activate
        ActiveChart.SeriesCollection.add Source:= _
            "index(Qr,1):index(Qr,NofP),index(indep,1):index(indep,NofP)", _
            Rowcol:=xlRows, SeriesLabels:=0, CategoryLabels:=True, _
            Replace:=False

        With ActiveChart.SeriesCollection(Nofseries)
            .Name = "Qr (MW)"
        End With

    End If

' Is Qc in the diagram ?
    Sheets("Control").Activate
    If Range("Control!StatusQc").Value = True Then

        Nofseries = Nofseries + 1

        Sheets("Results").Activate
        ActiveSheet.ChartObjects(1).Activate
        ActiveChart.SeriesCollection.add Source:= _
            "index(Qc,1):index(Qc,NofP),index(indep,1):index(indep,NofP)", _
            Rowcol:=xlRows, SeriesLabels:=0, CategoryLabels:=True, _
            Replace:=False

        With ActiveChart.SeriesCollection(Nofseries)
            .Name = "Qc (MW)"
        End With

    End If
    GoTo 10
End If

'Which are the Series of Composition (Composition set in one dimension)
'in the diagram
    If Range("Control!StatusNX1").Value = True Or _
        Range("Control!StatusXB").Value = True Or _
        Range("Control!StatusXD").Value = True Then

' Is XLi(NX1) in the diagram ?
    Sheets("Control").Activate
    If Range("Control!StatusNX1").Value = True Then

        Nofseries = Nofseries + 1

'Which is the series we need ?
        Sheets("Results").Activate
        ActiveSheet.ChartObjects(1).Activate
        ActiveChart.SeriesCollection.add Source:= _
            "index(XL,index(PosinXL,1),1):index(XL,index(PosinXL,1),NofP),index(indep,1):index(indep,NofP)", _
            Rowcol:=xlRows, SeriesLabels:=0, CategoryLabels:=True, _
            Replace:=False

```



```

    With ActiveChart.SeriesCollection(Nofseries)
        .Name = NX1
    End With

End If

' Is XB in the diagram ?
    Sheets("Control").Activate
    If Range("Control!StatusXB").Value = True Then

        Nofseries = Nofseries + 1

        Sheets("Results").Activate
        ActiveSheet.ChartObjects(1).Activate
        ActiveChart.SeriesCollection.add Source:= _
        "index(XB,NC,1):index(XB,NC,NofP),index(indep,1):index(indep,NofP)", _
        Rowcol:=xlRows, SeriesLabels:=0, CategoryLabels:=True, _
        Replace:=False

        With ActiveChart.SeriesCollection(Nofseries)
            .Name = "in B"
        End With

    End If

' Is XD in the diagram ?
    Sheets("Control").Activate
    If Range("Control!StatusXD").Value = True Then

        Nofseries = Nofseries + 1

        Sheets("Results").Activate
        ActiveSheet.ChartObjects(1).Activate

        ActiveChart.SeriesCollection.add Source:= _
        "index(XD,NC,1):index(XD,NC,NofP),index(indep,1):index(indep,NofP)", _
        Rowcol:=xlRows, SeriesLabels:=0, CategoryLabels:=True, _
        Replace:=False

        With ActiveChart.SeriesCollection(Nofseries)
            .Name = "in D"
        End With

    End If

    GoTo 10
End If

'Form of the diagram
10    Sheets("Results").Activate
        ActiveSheet.ChartObjects(1).Activate

        With ActiveChart
            .HasTitle = True
            .Axes(xlCategory, xlPrimary).HasTitle = False
            .Axes(xlValue, xlPrimary).HasTitle = True
            .Axes(xlValue, xlPrimary).AxisTitle.Select
        End With
        Selection.Characters.Text = onomaY

        ActiveChart.ChartArea.Select

```

```

ActiveChart.Axes(xlValue).AxisTitle.Select
With Selection
    .HorizontalAlignment = xlCenter
    .VerticalAlignment = xlCenter
    .Orientation = xlUpward
End With

```

```

Sheets("Control").Activate

```

```

If Range("Control!StatusNX1").Value = True Or _
Range("Control!StatusXB").Value = True Or _
Range("Control!StatusXD").Value = True Then
    Sheets("Results").Activate
    ActiveSheet.ChartObjects(1).Activate
    ActiveChart.ChartTitle.Select
    Selection.Characters.Text = onomaTitle
Else
    Sheets("Results").Activate
    ActiveSheet.ChartObjects(1).Activate
    ActiveChart.ChartTitle.Select
    Selection.Characters.Text = " "
End If

```

```

For I = 1 To Nofseries
    ActiveChart.SeriesCollection(I).Select
    With Selection
        .MarkerBackgroundColorIndex = xlNone
        .Smooth = True
    End With
Next I

```

```

ActiveChart.ChartArea.Select
With Selection.Font
    .Name = "Times New Roman Greek"
    .FontStyle = "Regular"
    .Size = 8
    .Strikethrough = False
    .Superscript = False
    .Subscript = False
    .OutlineFont = False
    .Shadow = False
    .Underline = xlNone
    .ColorIndex = xlAutomatic
    .Background = xlAutomatic
End With

```

```

ActiveChart.PlotArea.Select
With Selection
    .Width = 324
    .Height = 200
    .Left = 24
    .Top = 20
End With

```

```

With Selection.Border
    .ColorIndex = 16
    .Weight = xlThin
    .LineStyle = xlContinuous
End With

```

```

With Selection.Interior
    .ColorIndex = 2

```

```
.Pattern = xlSolid  
End With
```

```
With ActiveChart.Axes(xlCategory)  
.HasMajorGridlines = True  
.HasMinorGridlines = False  
.TickLabels.NumberFormat = "0.000"  
End With
```

```
With ActiveChart.Axes(xlValue)  
.HasMajorGridlines = True  
.HasMinorGridlines = False  
End With
```

```
ActiveChart.Axes(xlValue).MajorGridlines.Select  
With Selection.Border  
.ColorIndex = 16  
.Weight = xlHairline  
.LineStyle = xlContinuous  
End With
```

```
ActiveChart.Axes(xlCategory).MajorGridlines.Select  
With Selection.Border  
.ColorIndex = 16  
.Weight = xlHairline  
.LineStyle = xlContinuous  
End With
```

```
ActiveChart.Axes(xlValue).Select  
With ActiveChart.Axes(xlValue)  
.MinimumScale = MinVal  
.MaximumScale = MaxVal  
.MinorUnitIsAuto = True  
.MajorUnitIsAuto = True  
.Crosses = xlAutomatic  
.ReversePlotOrder = False  
.ScaleType = False  
End With
```

```
20 Sheets("Results").Activate  
ActiveSheet.ChartObjects(1).Select  
Selection.Cut  
Sheets("Control").Select  
Range("B38").Select  
ActiveSheet.Paste  
ActiveSheet.ChartObjects(1).Select  
With Selection  
.Left = 0  
.Top = 33  
.Height = 243.5  
.Width = 362.5  
End With  
ActiveSheet.ChartObjects(1).Activate  
ActiveChart.ChartTitle.Select  
Selection.Font.Bold = True
```

```
ActiveChart.Deselect  
ActiveWindow.Visible = False  
Range("A1").Select
```

```
Sheets("Control").Activate  
Range("StatusDiag").Value = 1
```

```

Else
'Delete the chart if it exists Status = 1 means that the chart exists
  Sheets("Control").Activate
  ActiveSheet.ChartObjects(1).Select
  Selection.Delete
  Range("Control!StatusDiag").Value = 0
End If

Application.ScreenUpdating = False

Beep

End Sub

```

MODULE MAKECOLUMN

```

Option Private Module
Option Base 1
Option Explicit

```

'We have to run at least once the program of the simple solution first
Sub Make_Distillation_Column()

```

Application.ScreenUpdating = False

If Range("Statusdist").Value = False Then
'Make the picture
  If Range("PARTREBOIL").Value = False And Range("PARTCOND").Value = False Then
    Call tctr
    GoTo 100
  End If
  If Range("PARTREBOIL").Value = True And Range("PARTCOND").Value = False Then
    Call tcpr
    GoTo 100
  End If
  If Range("PARTREBOIL").Value = True And Range("PARTCOND").Value = True Then
    Call pcpr
    GoTo 100
  End If
  If Range("PARTREBOIL").Value = False And Range("PARTCOND").Value = True Then
    Call ptr
    GoTo 100
  End If
100 Range("A1").Select
  Range("Statusdist").Value = True
Else
'Delete the picture
  ActiveSheet.DrawingObjects("DistColumn").Select
  Selection.Delete
  Range("Statusdist").Value = False
End If

Application.ScreenUpdating = True

Beep

End Sub

```

Sub tctr()

Dim I As Integer

'In the sheet of the column : clear the contents

Range("DistCompF").ClearContents

Range("DistCompB").ClearContents

Range("DistCompD").ClearContents

Range("DistZ").ClearContents

Range("DistXB").ClearContents

Range("DistXD").ClearContents

'Data transfer from the first run of the program

NOFC = Range("NOFC").Value

M = Range("M").Value

N = Range("N").Value

For I = 1 To NOFC

Range("DistCompF")(I).Value = Range("Compd")(I).Value

Range("DistCompD")(I).Value = Range("distCompF")(I).Value

Range("DistCompB")(I).Value = Range("distCompF")(I).Value

Range("DistZ")(I).Value = Range("Z")(I).Value

Range("DistXB")(I).Value = Range("XB")(I, 1).Value

Range("DistXD")(I).Value = Range("XD")(I, 1).Value

Next I

Range("DistF").Value = Range("Feed").Value

Range("Distq").Value = Range("q").Value

Range("DistP").Value = Range("P").Value

Range("DistN1_").Value = N

Range("DistM1_").Value = M

Range("DistM_1").Value = Range("M").Value + 1

Range("DistTM_1").Value = Range("Temp")(M + 1, 1).Value

Range("Distfirst").Value = 1

Range("DistT1_").Value = Range("Temp")(1, 1).Value

Range("DistN").Value = N

Range("DistTN").Value = Range("Temp")(N, 1).Value

Range("DistB").Value = Range("B")(1).Value

Range("DistTB").Value = Range("Temp")(1, 1).Value

Range("DistQr").Value = Range("Qr")(1).Value

Range("DistD").Value = Range("D")(1).Value

Range("DistTD").Value = Range("TD")(1).Value

Range("DistQc").Value = Range("Qc")(1).Value

Range("DistL").Value = Range("L").Value

Range("DistV").Value = Range("V")(1).Value

Range("DistLs").Value = Range("Ls")(1).Value

Range("DistVs").Value = Range("Vs")(1).Value

'Make the chart

Sheets("Results").Activate

Range("AW2:BE35").Select

Selection.Copy

Sheets("Control").Select

ActiveSheet.Pictures.add(256.5, 391.5, 514.5, 685.5).Select

Selection.Interior.ColorIndex = 2

Application.CutCopyMode = False

With Selection

.Left = 175.7

.Top = 33

.Height = 308.25

.Width = 256.5

.Name = "DistColumn"

End With
End Sub

Sub tcpr()

Dim I As Integer

'In the sheet of the column : clear the contents

Range("DistCompF2").ClearContents
Range("DistCompB2").ClearContents
Range("DistCompD2").ClearContents
Range("DistZ2").ClearContents
Range("DistXB2").ClearContents
Range("DistXD2").ClearContents

'Data transfer from the first run of the program

NOFC = Range("NOFC").Value

M = Range("M").Value

N = Range("N").Value

For I = 1 To NOFC

Range("DistCompF2")(I).Value = Range("Compd")(I).Value
Range("DistCompD2")(I).Value = Range("distCompF")(I).Value
Range("DistCompB2")(I).Value = Range("distCompF")(I).Value
Range("DistZ2")(I).Value = Range("Z")(I).Value
Range("DistXB2")(I).Value = Range("XB")(I, 1).Value
Range("DistXD2")(I).Value = Range("XD")(I, 1).Value

Next I

Range("DistF2").Value = Range("Feed").Value

Range("Distq2").Value = Range("q").Value

Range("DistP2").Value = Range("P").Value

Range("DistN2_").Value = N

Range("DistM2_").Value = M

Range("DistM_12").Value = Range("M").Value + 1

Range("DistTM_12").Value = Range("Temp")(M + 1, 1).Value

Range("Distfirst2").Value = 2

Range("DistT1_2").Value = Range("Temp")(2, 1).Value

Range("DistN2").Value = N

Range("DistTN2").Value = Range("Temp")(N, 1).Value

Range("DistB2").Value = Range("B")(1).Value

Range("DistTB2").Value = Range("Temp")(1, 1).Value

Range("DistQr2").Value = Range("Qr")(1).Value

Range("DistD2").Value = Range("D")(1).Value

Range("DistTD2").Value = Range("TD")(1).Value

Range("DistQc2").Value = Range("Qc")(1).Value

Range("DistL2").Value = Range("L").Value

Range("DistV2").Value = Range("V")(1).Value

Range("DistLs2").Value = Range("Ls")(1).Value

Range("DistVs2").Value = Range("Vs")(1).Value

'Make the chart

Sheets("Results").Activate

Range("BK2:BS35").Select

Selection.Copy

Sheets("Control").Select

ActiveSheet.Pictures.add(256.5, 391.5, 514.5, 685.5).Select

Selection.Interior.ColorIndex = 2

Application.CutCopyMode = False

With Selection

.Left = 175.7

.Top = 33

.Height = 308.25

```

        .Width = 256.5
        .Name = "DistColumn"
    End With
End Sub

```

Sub pcpr()

```
Dim I As Integer
```

```
'In the sheet of the column : clear the contents
```

```
    Range("DistCompF3").ClearContents
```

```
    Range("DistCompB3").ClearContents
```

```
    Range("DistCompD3").ClearContents
```

```
    Range("DistZ3").ClearContents
```

```
    Range("DistXB3").ClearContents
```

```
    Range("DistXD3").ClearContents
```

```
'Data transfer from the first run of the program
```

```
    NOFC = Range("NOFC").Value
```

```
    M = Range("M").Value
```

```
    N = Range("N").Value
```

```
    For I = 1 To NOFC
```

```
        Range("DistCompF3")(I).Value = Range("Compd")(I).Value
```

```
        Range("DistCompD3")(I).Value = Range("distCompF")(I).Value
```

```
        Range("DistCompB3")(I).Value = Range("distCompF")(I).Value
```

```
        Range("DistZ3")(I).Value = Range("Z")(I).Value
```

```
        Range("DistXB3")(I).Value = Range("XB")(I, 1).Value
```

```
        Range("DistXD3")(I).Value = Range("XD")(I, 1).Value
```

```
    Next I
```

```
    Range("DistF3").Value = Range("Feed").Value
```

```
    Range("Distq3").Value = Range("q").Value
```

```
    Range("DistP3").Value = Range("P").Value
```

```
    Range("DistN3_").Value = N
```

```
    Range("DistM3_").Value = M
```

```
    Range("DistM_13").Value = Range("M").Value + 1
```

```
    Range("DistTM_13").Value = Range("Temp")(M + 1, 1).Value
```

```
    Range("Distfirst3").Value = 2
```

```
    Range("DistT1_3").Value = Range("Temp")(2, 1).Value
```

```
    Range("DistN3").Value = N - 1
```

```
    Range("DistTN3").Value = Range("Temp")(N - 1, 1).Value
```

```
    Range("DistB3").Value = Range("B")(1).Value
```

```
    Range("DistTB3").Value = Range("Temp")(1, 1).Value
```

```
    Range("DistQr3").Value = Range("Qr")(1).Value
```

```
    Range("DistD3").Value = Range("D")(1).Value
```

```
    Range("DistTD3").Value = Range("TD")(1).Value
```

```
    Range("DistQc3").Value = Range("Qc")(1).Value
```

```
    Range("DistL3").Value = Range("L").Value
```

```
    Range("DistV3").Value = Range("V")(1).Value
```

```
    Range("DistLs3").Value = Range("Ls")(1).Value
```

```
    Range("DistVs3").Value = Range("Vs")(1).Value
```

```
'Make the chart
```

```
    Sheets("Results").Activate
```

```
    Range("BV2:CD35").Select
```

```
    Selection.Copy
```

```
    Sheets("Control").Select
```

```
    ActiveSheet.Pictures.add(256.5, 391.5, 514.5, 685.5).Select
```

```
    Selection.Interior.ColorIndex = 2
```

```
    Application.CutCopyMode = False
```

```
    With Selection
```

```
        .Left = 175.7
```

```

.Top = 33
.Height = 308.25
.Width = 256.5
.Name = "DistColumn"
End With
End Sub

```

Sub petr()

```
Dim I As Integer
```

```
'In the sheet of the column : clear the contents
```

```

Range("DistCompF4").ClearContents
Range("DistCompB4").ClearContents
Range("DistCompD4").ClearContents
Range("DistZ4").ClearContents
Range("DistXB4").ClearContents
Range("DistXD4").ClearContents

```

```
'Data transfer from the first run of the program
```

```
NOFC = Range("NOFC").Value
```

```
M = Range("M").Value
```

```
N = Range("N").Value
```

```
For I = 1 To NOFC
```

```

Range("DistCompF4")(I).Value = Range("Compd")(I).Value
Range("DistCompD4")(I).Value = Range("distCompF")(I).Value
Range("DistCompB4")(I).Value = Range("distCompF")(I).Value
Range("DistZ4")(I).Value = Range("Z")(I).Value
Range("DistXB4")(I).Value = Range("XB")(I, 1).Value
Range("DistXD4")(I).Value = Range("XD")(I, 1).Value

```

```
Next I
```

```

Range("DistF4").Value = Range("Feed").Value
Range("Distq4").Value = Range("q").Value
Range("DistP4").Value = Range("P").Value
Range("DistN4_").Value = N
Range("DistM4_").Value = M

```

```
Range("DistM_14").Value = Range("M").Value + 1
```

```
Range("DistTM_14").Value = Range("Temp")(M + 1, 1).Value
```

```
Range("Distfirst4").Value = 1
```

```
Range("DistT1_4").Value = Range("Temp")(1, 1).Value
```

```
Range("DistN4").Value = N - 1
```

```
Range("DistTN4").Value = Range("Temp")(N - 1, 1).Value
```

```
Range("DistB4").Value = Range("B")(1).Value
```

```
Range("DistTB4").Value = Range("Temp")(1, 1).Value
```

```
Range("DistQr4").Value = Range("Qr")(1).Value
```

```
Range("DistD4").Value = Range("D")(1).Value
```

```
Range("DistTD4").Value = Range("TD")(1).Value
```

```
Range("DistQc4").Value = Range("Qc")(1).Value
```

```
Range("DistL4").Value = Range("L").Value
```

```
Range("DistV4").Value = Range("V")(1).Value
```

```
Range("DistLs4").Value = Range("Ls")(1).Value
```

```
Range("DistVs4").Value = Range("Vs")(1).Value
```

```
'Make the chart
```

```
Sheets("Results").Activate
```

```
Range("CG2:CO35 ").Select
```

```
Selection.Copy
```

```
Sheets("Control").Select
```

```
ActiveSheet.Pictures.add(256.5, 391.5, 514.5, 685.5).Select
```

```
Selection.Interior.ColorIndex = 2
```

```
Application.CutCopyMode = False
```



```
With Selection
  .Left = 175.7
  .Top = 33
  .Height = 308.25
  .Width = 256.5
  .Name = "DistColumn"
End With
End Sub
```