

УДК 66.047

І.О. Гузьова

МОДЕЛЮВАННЯ В CHEMCAD ПРОЦЕСУ ПЕРЕГАННЯ РАФІНАТУ БЕНЗОЛЬНОГО ВИРОБНИЦТВА З МЕТОЮ ОДЕРЖАННЯ НАФТОВИХ РОЗЧИННИКІВ

Національний університет «Львівська політехніка», м. Львів, Україна

В даній роботі досліджуються моделі технологічної лінії виробництва нафтових розчинників з метою модернізації обладнання. Обґрунтований вибір модуля розрахунку процесу ректифікації – Distillation column (TOWR). Обґрунтований вибір моделі ЮНІФАК для розрахунку термодинамічної системи та фазової рівноваги даної багатокомпонентної суміші. В УМП ChemCad розроблена модель технологічного вузла процесу перегання рафінату бензольного виробництва. На основі отриманих результатів моделювання спроектований технологічний вузол, в якому утворюються: легка фракція петролейного ефіру, важка фракція петролейного ефіру, бензин-розчинник для гумової промисловості. Хімічний склад фракцій повністю відповідає державним стандартам. В результаті моделювання отримано технологічні, конструктивні та вартісні характеристики ректифікаційних колон, а також оптимізовано якісні та кількісні характеристики фракцій, отриманих в результаті перегання. Доведено, що дві ректифікаційні колони по 12 тарілок, одержані в результаті моделювання, дають аналогічний результат у порівнянні з двома колонами по 40 тарілок кожна, що використовуються у діючих технологічних лініях. Отримані результати моделювання в УМП ChemCad дають змогу модернізувати обладнання шляхом зменшення кількості тарілок більш, ніж в 3 рази, і таким чином зменшити вартість обладнання.

Ключові слова: петролейний ефір, бензин розчинник, ректифікація, модель ЮНІФАК, ChemCad, моделювання.

DOI: 10.32434/0321-4095-2019-127-6-60-68

Вступ

В умовах складної економічної ситуації в Україні важливе значення має модернізація існуючих нафтопереробних виробництв і впровадження нових технологічних ліній. З розвитком комп'ютерних технологій та появою нових універсальних моделюючих програм (УМП), все більш можливим стає моделювання процесів та обладнання на існуючих підприємствах, а також моделювання нових технологічних процесів. Результати моделювання дають змогу суттєво скоротити час експлуатації обладнання та витрати на здійснення технологічних процесів, модернізувати обладнання щодо вимог виробництв сучасного рівня, а також, шляхом моделювання, створити нове модернізоване обладнання.

Саме тому розроблення в УМП ChemCad моделі технологічної лінії виробництва нафтових розчинників, а також обґрунтування засто-

сування сучасних термодинамічних моделей для розрахунку процесів ректифікації продуктів бензольного виробництва є актуальною задачею.

Під час моделювання та розрахунку в УМП ChemCad процесів ректифікації продуктів бензольного виробництва важливим завданням є правильний вибір моделей розрахунку процесу ректифікації багатокомпонентних систем. В УМП ChemCad ректифікація багатокомпонентних систем надана трьома модулями: Distillation column (TOWR), Rigorous distillation column (SCDS) та Tower plus (TPLS). Першим етапом прийняття рішення щодо вибору модуля є аналіз якісного та кількісного складу речовин, що приймають участь в процесі [1]. Принципи вибору того чи іншого модуля базуються на аналізі складу фаз компонентів та на наявності чи відсутності хімічних реакцій в колоні [1]. Також на вибір модуля будуть впливати вимоги до кон-

тактних пристроїв та кількість точок відбору готового продукту за висотою колони [2].

Важливим етапом моделювання ректифікації багатокомпонентних систем є вибір термодинамічних моделей. Так автори [3] вказують на те, що існує ціла низка методів розрахунку коефіцієнта активності та ентальпії за умов відсутності експериментальних даних. Наведені авторами моделі та методи розрахунку [4] дозволяють змоделювати рівноважний стан багатокомпонентних систем для бінарних пар «пара-рідина», «рідина-рідина», «пара-рідина-рідина». При моделюванні процесу ректифікації багатокомпонентних систем в УМП ChemCad такі розрахунки здійснюються в автоматизованому режимі. Тому розробникам моделі необхідно створити банк даних режиму роботи колони, а також якісного та кількісного складу речовин.

Наступний етап – це вибір термодинамічної моделі на основі існуючих в літературі рекомендацій [5]. Так, в літературі [6] наведена низка фундаментальних рівнянь стану для моделювання фазового переходу «рідина-газ», що задовольняють умовам критичної точки та можуть бути наведені у вигляді залежності термодинамічного потенціалу від власних змінних. Такі рівняння використовують для розрахунку термодинамічних систем і фазової рівноваги вуглеводнів та вуглеводневих сумішей як штучних так і природних, зокрема – нафта, газовий конденсат, природний газ. Аналізуючи роботи [3–6] можна зробити висновок, що найбільш надійними рівняннями для розрахунку термодинамічних систем є рівняння Пенга-Робінсона [3], Пателя-Тейя, Соаве-Редліх-Квонга [4], ЮНІФАК, АСОГ [5], Харменса-Кнаппа [6].

Метою даної роботи є обґрунтування застосування сучасних термодинамічних моделей, розроблення в УМП ChemCad моделі технологічної лінії виробництва нафтових розчинників, а також модернізація обладнання щодо вимог виробництв сучасного рівня.

Для цього необхідно вирішити наступні задачі:

– вибрати моделі розрахунку процесу ректифікації рафінату бензольного виробництва;

– вибрати моделі для розрахунку термодинамічної системи та фазової рівноваги даної багатокомпонентної суміші;

– на основі обраних моделей в УМП ChemCad розробити та здійснити моделювання технологічної лінії виробництва нафтових розчинників.

Матеріали і методи досліджень

Для правильного вибору термодинамічної моделі необхідно розглядати молекули досліджуваної багатокомпонентної суміші як агрегат функціональних груп. Тоді термодинамічні властивості чистих рідин можуть бути розраховані як сума групових складових. Завдяки цьому коректуються термодинамічні властивості великої кількості рідин через менше число параметрів, що характеризують внески окремих груп.

Для багатокомпонентної суміші, такої як рафінат бензольного виробництва, ці розрахунки можна зробити, використовуючи модель ЮНІФАК [7].

Формули моделі ЮНІФАК (UNIFAC–UNIQUAC Functional-Group Activity Coefficients) по визначенню коефіцієнта активності мають вигляд:

$$\ln \gamma_i = \ln \gamma_i^C + \ln \gamma_i^R, \quad (1)$$

де γ_i^C – комбінаторна частина, що відображує енергетичні взаємодії; γ_i^R – залишкова частина.

Обидві частини рівняння розраховуються наступним чином:

$$\ln \gamma_i^C = \ln \frac{\Phi_i}{x_i} + \frac{z}{2} \cdot q_i \cdot \ln \frac{\theta_i}{\Phi_i} + l_i - \frac{\Phi_i}{x_i} \cdot \sum_{j=1}^N x_j \cdot l_j; \quad (2)$$

$$\Phi_i = \frac{x_i \cdot r_i}{\sum_{k=1}^C x_k \cdot r_k}; \quad \theta_i = \frac{x_i \cdot q_i}{\sum_{k=1}^C x_k \cdot q_k};$$

$$l_i = \left(\frac{z}{2} \right) \cdot (r_i - q_i) - (r_i - 1); \quad (3)$$

$$q_i = \sum_{k=1}^N v_k^{(i)} \cdot Q_k; \quad r_i = \sum_{k=1}^N v_k^{(i)} \cdot R_k; \quad (4)$$

$$\ln \gamma_i^R = \sum_{k=1}^N v_k^{(i)} \cdot (\ln \Gamma_k - \ln \Gamma_k^{(i)}); \quad (5)$$

$$\ln \Gamma_k = Q_k \left[1 - \ln \sum_{m=1}^N \theta_m \cdot \psi_{mk} - \frac{\sum_{m=1}^N \theta_m \cdot \psi_{km}}{\sum_{n=1}^N \theta_n \cdot \psi_{nm}} \right]; \quad (6)$$

$$\theta_m = \frac{Q_m \cdot X_m}{\sum_{n=1}^N Q_n \cdot X_n}; \quad X_m = \frac{\sum_{i=1}^C v_m^{(i)} \cdot X_i}{\sum_{i=1}^C \sum_{n=1}^N v_n^{(i)} \cdot X_i}; \quad (7)$$

$$\Psi_{mn} = \exp\left(-\frac{U_{mn} - U_{nn}}{RT}\right) = \exp\left(-\frac{a_{mn}}{T}\right), \quad (8)$$

де R_k, Q_k – групові параметри об'єму та площі; $v_k^{(i)}$ – ціле число, яке визначає число груп типу k в молекулі i ; N – число типів груп в суміші; a_{mn} – параметри групової взаємодії K , $a_{mn} \neq a_{nm}$, $a_{mm} = 0$; $\Gamma_k^{(i)}$ – розраховується за формулою (6) за умов, що система містить тільки i -й компонент.

Таким чином, параметри моделі ЮНІФАК, що забезпечують розрахунок коефіцієнта активності ϵ : число k -х груп в i -й молекулі $v_k^{(i)}$; групові параметри об'єму R_k та площі Q_k ; парамет-

ри групової взаємодії a_{mn}, a_{nm} . Числові значення R_k, Q_k, a_{mn}, a_{nm} наведені в літературі [8–10].

Модель ЮНІФАК використовується для розрахунку фазової рівноваги для неідеальних рідких фаз, що не змішуються, гетерогенних азеотропів в умовах діапазону тисків від 1 до 4 атм та температур від 275 К до 475 К, що цілком відповідає як хімічному складу досліджуваної багатокомпонентної суміші (табл. 1, потік 1), так і умовам здійснення технологічного процесу (табл. 2).

На рис. 1 зображено модель основного технологічного вузла процесу переганяння рафіна-ту бензольного виробництва з метою одержання нафтових розчинників, яка є розробленою в УМП ChemCad. Такий технологічний вузол працює наступним чином: вихідна багатокомпонентна суміш рафіна-ту бензольного виробництва потоком 1 подається на живильну тарілку ректифікаційної колони 3г, де розділяється на верхній продукт (потік 2) та кубовий залишок (потік 4).

Таблиця 1

Хімічний склад багатокомпонентної суміші рафіна-ту бензольного виробництва (потік 1), легкої фракції петролейного ефіру (потік 7), багатокомпонентної суміші на вході в колону 4г (потік 5), важкої фракції петролейного ефіру (потік 11), бензину розчинника для гумової промисловості (потік 12)

№	Назва компонента	$T_k, ^\circ\text{C}$ (1 атм.)	Концентрація речовин в потоці, мас.%				
			1	7	5	11	12
1	Ізопентан	27,8	1,628500	5,10600	0,0860	0,25200	0,00098
2	Н-пентан	36,0	1,820900	5,43900	0,2160	0,64300	0,00660
3	Циклопентан	49,3	0,159700	0,37400	0,0640	0,18700	0,01130
4	2,2-диметилбутан	49,7	3,041399	6,82000	1,3660	3,85500	0,28500
5	2,3-диметилбутан	57,9	20,067500	33,65500	14,0430	32,54900	6,34700
6	3-метилпентан	63,3	13,076000	17,67300	11,0370	20,86800	6,99000
7	Н-гексан	68,7	20,102800	19,79100	20,2400	26,57700	17,61700
8	Метилциклопентан	71,8	7,054000	6,12800	7,4650	8,31700	7,10000
9	2,2-диметилпентан	79,2	1,011000	0,45200	1,2590	0,61400	1,52400
10	Бензол	80,1	0,272300	0,32200	0,2500	0,40900	0,18300
11	Циклогексан	80,7	3,575700	1,51800	4,4879	2,04450	5,4970
12	2,2,3-триметилпентан	86,6	0,915000	0,00830	1,3170	0,01400	1,86300
13	2,3-диметилпентан	89,8	7,012300	1,13700	9,6180	1,51600	12,99000
14	3-метилгексан	91,8	8,887300	1,12700	12,3280	1,51700	16,83900
15	Н-гептан	98,4	7,000800	0,36900	9,9410	0,52160	13,88000
16	2,2,4-триметилпентан	99,2	0,200000	0,00840	0,2850	0,01180	0,39900
17	Метилциклогексан	100,9	0,372100	0,01690	0,5290	0,02300	0,74150
18	1,1,3-триметилциклопентан	104,9	0,228100	0,00510	0,3300	0,00740	0,46070
19	Толуол	110,0	0,715900	0,04500	1,0130	0,06260	1,41000
20	2,3-диметилгексан	115,6	0,156800	0,00057	0,2260	0,00110	0,32000
21	2-метилгептан	117,6	0,539600	0,00140	0,7780	0,00290	1,10300
22	4-метилгептан	117,7	0,243200	0,00063	0,3510	0,00130	0,49700
23	3-метилгептан	118,9	0,835500	0,00170	1,2050	0,00370	1,70800
24	Н-октан	125,7	0,415300	0,00029	0,5990	0,00076	0,85000
25	Етилбензол	136,0	0,150900	0,00013	0,2180	0,00032	0,30900
26	Ксилол	136,4	0,517000	0,00012	0,7460	0,00037	1,05850

Таблиця 2

Технологічна карта процесу

№	Параметр	Одиниці	Значення	Допустимі відхилення
1	Температура входу сировини в колону 3г	°C	105	±5
2	Температура верху колони 3г	°C	95	±5
3	Температура низу колони 3г	°C	120	±5
4	Температура входу сировини в колону 4г	°C	128	±5
5	Температура верху колони 4г	°C	110	±5
6	Температура низу колони 4г	°C	143	±5
7	Витрата флегми на зрошення колони 3г	кг/год	5356,92	±120
8	Витрата флегми на зрошення колони 4г	кг/год	3565,44	±120
9	Температура, до якої охолоджується флегма на зрошення колон 3г та 4г	°C	40	±5
10	Тиск на верху колони 3г	атм	2,8	±0,1
11	Тиск в живильній частині колони 3г	атм	3	±0,1
12	Тиск на верху колони 4г	атм	3,1	±0,1
13	Тиск в живильній частині колони 4г	атм	3,5	±0,1

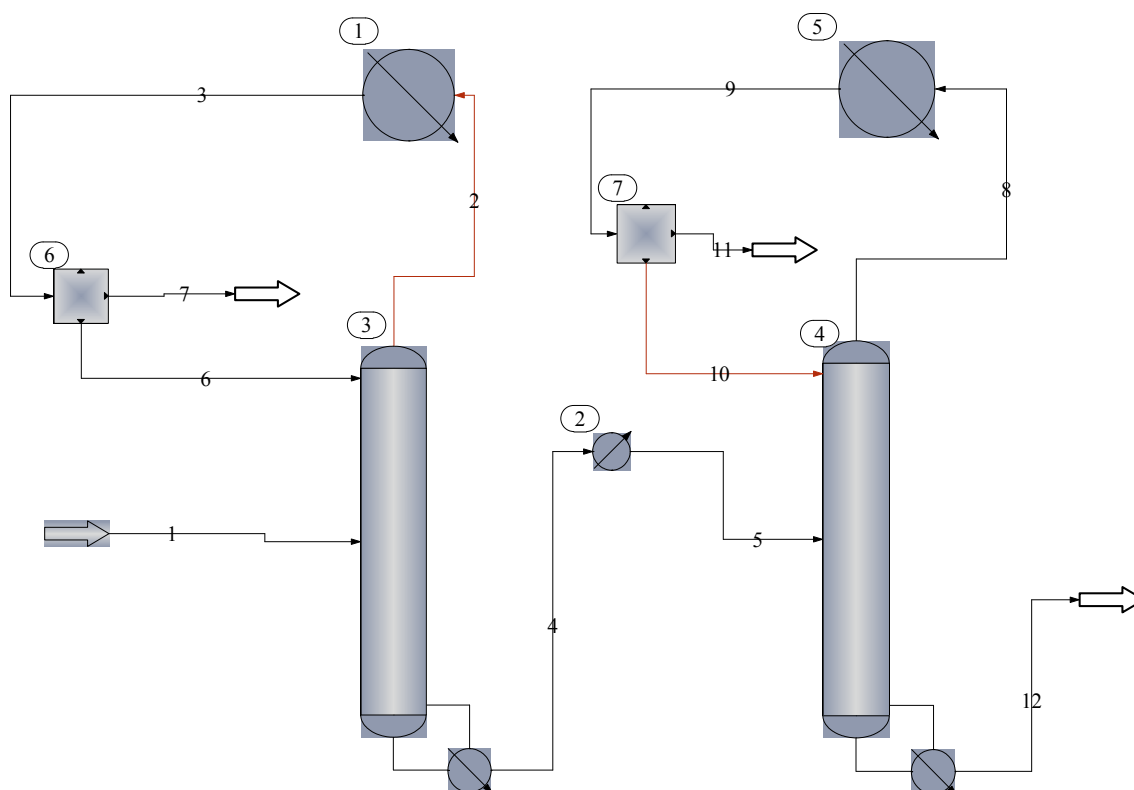


Рис. 1. Модель технологічного вузла процесу переганяння рафінату бензольного виробництва, розроблена в УМП ChemCad. Апарати: 1t, 5t – дефлегматори (модуль HTXR); 2t – підігрівач (модуль HTXR); 3г, 4г – ректифікаційні колони (модуль TOWER); 6d, 7d – розділювачі вхідного потоку (модуль DIVI). Потoki: 1 – вихідна багатокомпонентна суміш рафінату бензольного виробництва; 2 – вихід пари верхнього продукту з ректифікаційної колони 3г; 3 – конденсат верхнього продукту на виході з дефлегматора 1t; 4 – вихід нижнього продукту з ректифікаційної колони 3г; 5 – вхід нижнього продукту на живильну тарілку ректифікаційної колони 4г; 6 – флегма, що являє собою легку фракцію петролейного ефіру; 7 – дистилат, що являє собою легку фракцію петролейного ефіру; 8 – вихід пари верхнього продукту з ректифікаційної колони 4г; 9 – конденсат верхнього продукту на виході з дефлегматора 5t; 10 – флегма, що являє собою важку фракцію петролейного ефіру; 11 – дистилат, що являє собою важку фракцію петролейного ефіру; 12 – вихід бензину розчинника для гумової промисловості

В дефлегматорі 1t відбувається конденсація верхнього продукту, далі потоком 3 конденсат потрапляє в розділювач 6d, де розділяється на дистилат, що являє собою легку фракцію петролейного ефіру (потік 7), та флегму (потік 6), що повертається на зрошення колони 3г на її першу верхню тарілку. Нижній продукт (потік 4) з колони 3г, підігріваючись в підігрівачі 2t, потрапляє на живильну тарілку ректифікаційної колони 4г (потік 5). В ректифікаційній колоні 4г суміш розділяється на дистилат (потік 11) та кубовий залишок (потік 12). Дистилат являє собою важку фракцію петролейного ефіру, кубовий залишок – бензин розчинник для гумової промисловості. Флегма (потік 10) повертається на зрошення колони 4г на її верхню тарілку № 1.

Результати та їх обговорення

Технологічні лінії переганяння рафінату бензолного виробництва оснащені двома ректифікаційними колонами діаметром 1 м кожна та кількістю тарілок 40 шт кожна.

В результаті моделювання в ChemCad процесу переганяння рафінату бензолного виробництва, було отримано технологічні, конструктивні та вартісні характеристики ректифікаційних колон (табл. 3). Як видно з табл. 3 і для колони 3г і для колони 4г діаметр дорівнює 1 м, а кількість тарілок – 12. Таким чином, моделювання в ChemCad із застосуванням сучасних моделей дає можливість зменшити кількість тарілок більш, ніж в 3 рази.

Графічні характеристики зміни концент-

Таблиця 3

Технологічні, конструктивні та вартісні характеристики ректифікаційних колон 3г та 4г, отримані в результаті моделювання в ChemCad

Ректифікаційна колона 3г		Ректифікаційна колона 4г	
TOWER Rigorous Distillation Summary		TOWER Rigorous Distillation Summary	
Equip. No.	3	Equip. No.	4
Name	r	Name	r
No. of stages	12	No. of stages	12
1st feed stage	1	1st feed stage	1
2nd feed stage	6	2nd feed stage	5
Top pressure atm	2.8000	Top pressure atm	3.1000
Colm pressure drop (atm)	0.6000	Colm pressure drop (atm)	0.6000
Condenser type	1	Condenser type	1
Condenser mode	11	Condenser mode	11
Condenser spec.	5356.9199	Condenser spec.	3565.4399
Reboiler mode	1	Reboiler mode	1
Reboiler spec.	1.2000	Reboiler spec.	1.2000
Calc cond duty MJ/h	-1245.9086	Calc cond duty MJ/h	-3868.5493
Calc rebr duty MJ/h	3323.5269	Calc rebr duty MJ/h	2306.2439
Est. Dist. rate (kmol/h)	63.6118	Est. Dist. rate (kmol/h)	41.5435
Est. Reflux rate (kmol/h)	183.7455	Est. Reflux rate (kmol/h)	140.8822
Est. T top C	95.0000	Est. T top C	110.0000
Est. T bottom C	120.0000	Est. T bottom C	143.0000
Est. T 2 C	93.2070	Est. T 2 C	105.0854
Column diameter m	0.9144	Column diameter m	1.0000
Tray space m	0.6096	Thickness (top) m	0.0024
Thickness (top) m	0.0024	Thickness (bot) m	0.0032
Thickness (bot) m	0.0032	Install factor	3.0000
Install factor	3.0000	Column purchase \$	49299
Column purchase \$	46934	Column installed \$	147896
Column installed \$	140802	Cost estimation flag	1
Cost estimation flag	1	Shell weight kg	484
Shell weight kg	438	Cost of shell \$	11976
Cost of shell \$	11433	Cost of trays \$	9971
Cost of trays \$	9496	Platform & ladder \$	4799
Platform & ladder \$	4535	Total purchase \$	49299
No of sections	1	Total installed \$	147896
Total purchase \$	46934	Calc Reflux ratio	3.9341
Total installed \$	140802	Calc Reflux mole (kmol/h)	162.6271
Calc Reflux ratio	1.0694	Calc Reflux mass kg/h	14111.1533
Calc Reflux mole (kmol/h)	67.7468	Optimization flag	1
Calc Reflux mass kg/h	5813.8228		
No of passes (S1)	1		
Weir side width m	0.1778		
Weir height m	0.0508		
System factor	1.0000		

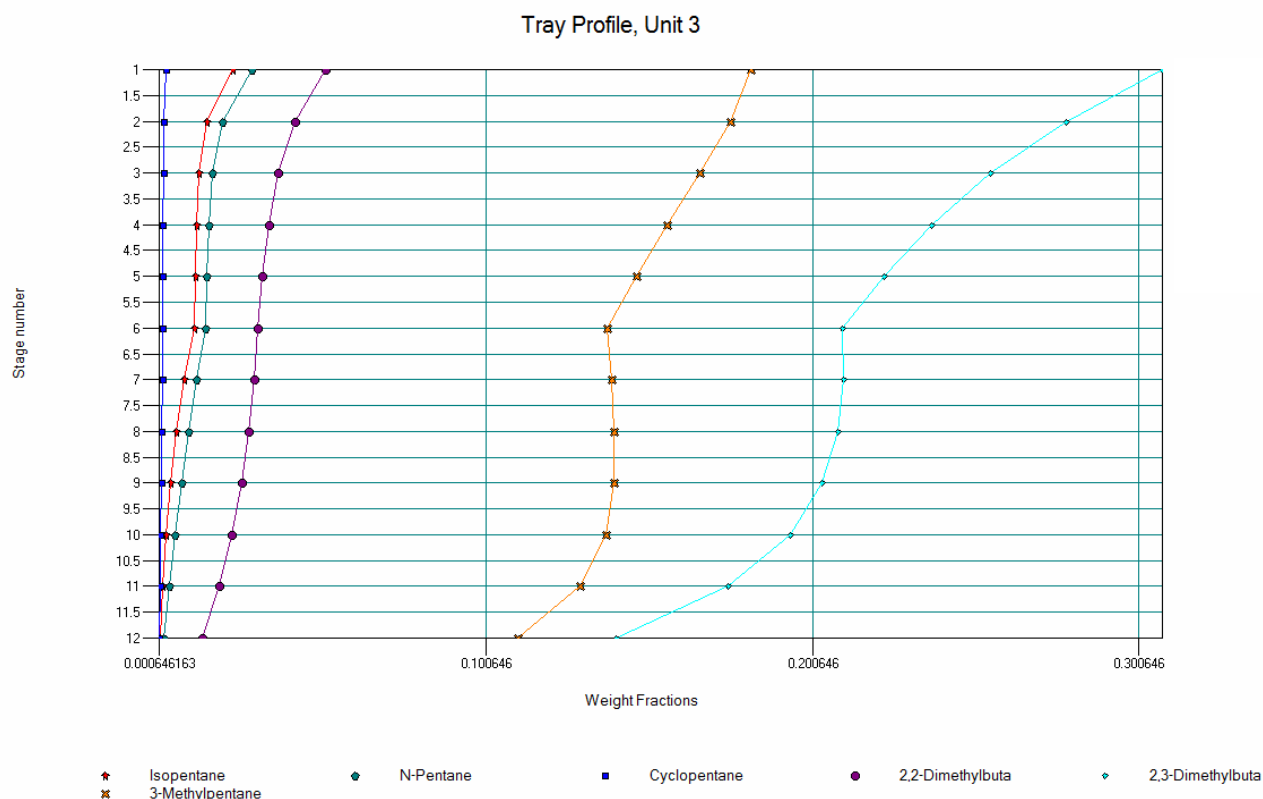


Рис. 2. Зміна концентрації основних речовин легкої фракції петролейного ефіру за висотою колони 3г

рації основних речовин кожної фракції за висотою колони наведені на рис. 2–4.

З рис. 2 випливає, що концентрації речовин № 1–6 (табл. 1) зростають за висотою колони 3г. На виході з колони сумарна концентрація речовин № 1–6 перевищує 60% (табл. 4). Отже, в результаті переганяння суміші в ректифікаційній колоні 3г, верхній продукт буде являти собою суміш, основні речовини якої (№ 1–6) є складовими легкої фракції петролейного ефіру [11].

З рис. 3 видно, що концентрації речовин № 1–8 (табл. 1) зростають за висотою колони 4г. На виході з колони сумарна концентрація речовин № 1–8 перевищує 90% (табл. 5). Таким чином, в результаті переганяння суміші в ректифікаційній колоні 4г, верхній продукт буде являти собою суміш, основні речовини (№ 1–8) якої відповідають складовим важкої фракції петролейного ефіру [11].

З даних, наведених на рис. 4, видно, що концентрації речовин № 11–15, 19, 21, 23 і 26 (табл. 1) зростають уздовж колони зверху вниз. На виході з нижньої частини ректифікаційної колони 4г (12-та тарілка) одержимо змішану фракцію вуглеводнів, температура кипіння якої

перевищує 80°C. Така фракція являє собою бензин-розчинник для гумової промисловості [11].

Доцільно порівняти процентний вміст основних речовин кожної отриманої фракції в результаті переганяння в ректифікаційних колонах, що мають по 12 тарілок з аналогічними результатами для ректифікаційних колон, модельованих в УМП ChemCad, що мають по 40 тарілок (табл. 4–6). При цьому модель технологічного вузла процесу переганяння аналогічна до моделі, зображеної на рис. 1.

Як впливає з отриманих даних, похибка між концентраціями основних речовин, що одержані в результаті переганяння колоною на 12 тарілок, та концентраціями основних речовин, що одержані в результаті переганяння колоною на 40 тарілок, не перевищує 6%. Також в результаті переганяння рафінату бензолного виробництва колоною на 12 тарілок не порушуються якісні та кількісні характеристики речовин, що входять в склад одержаних фракцій: легкої фракції петролейного ефіру, важкої фракції петролейного ефіру та бензину розчинника для гумової промисловості.

Висновки

В УМП ChemCad розроблена модель тех-

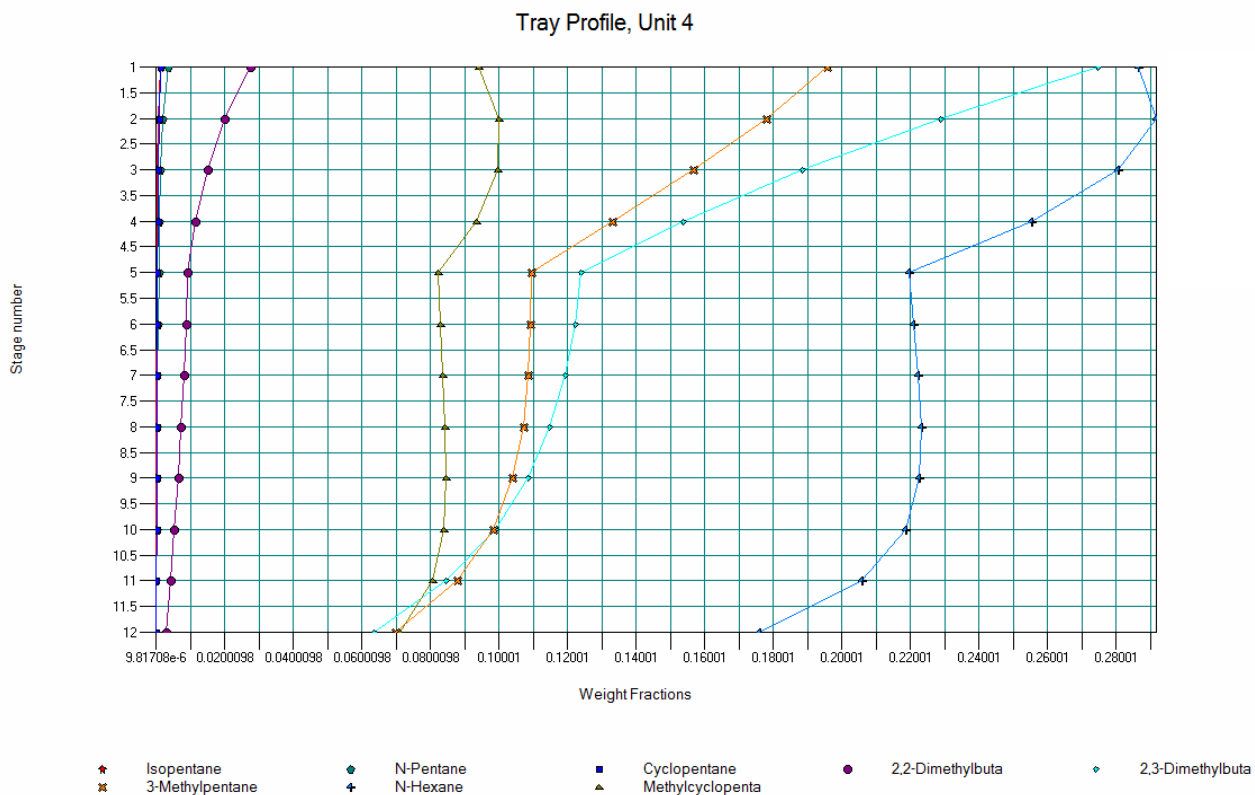


Рис. 3. Зміна концентрації основних речовин важкої фракції петролейного ефіру за висотою колони 4г

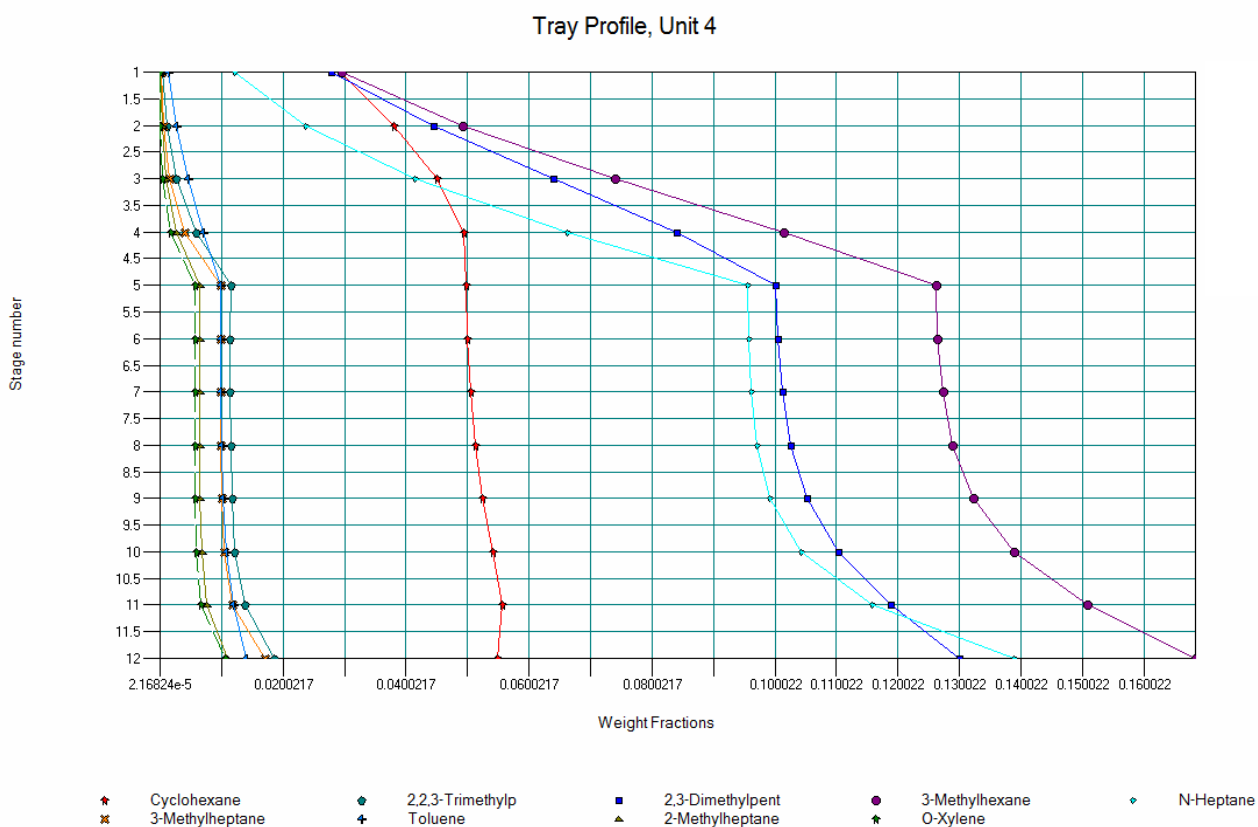


Рис. 4. Зміна концентрації основних речовин бензину розчинника для гумової промисловості за висотою колони 4г

Таблиця 4
Порівняльний аналіз концентрацій речовин легкої фракції петролейного ефіру (потік 7)

№	Компоненти	Концентрація речовин в потоці 7, мас %	
		12 тарілок	40 тарілок
1	Ізопентан	5,106	5,298
2	Н-пентан	5,439	5,878
3	Циклопентан	0,374	0,4
4	2,2-диметилбутан	6,82	7,205
5	2,3-диметилбутан	33,655	34,20
6	3-метилпентан	17,673	17,94

Таблиця 5
Порівняльний аналіз концентрацій речовин важкої фракції петролейного ефіру (потік 11)

№	Компоненти	Концентрація речовин в потоці 11, мас %	
		12 тарілок	40 тарілок
1	Ізопентан	0,252	0,3
2	Н-пентан	0,643	0,57
3	Циклопентан	0,187	0,15
4	2,2-диметилбутан	3,855	3,98
5	2,3-диметилбутан	32,549	32,17
6	3-метилпентан	20,868	21,31
7	Н-гексан	26,577	26,71
8	Метилциклопентан	8,317	8,41

Таблиця 6
Порівняльний аналіз концентрацій речовин бензину розчинника для гумової промисловості (потік 12)

№	Компоненти	Концентрація речовин в потоці 12, мас %	
		12 тарілок	40 тарілок
11	Циклогексан	5,497	5,32
12	2,2,3-триметилпентан	1,863	1,411
13	2,3-диметилпентан	12,99	11,73
14	3-метилгексан	16,839	15,86
15	Н-гептан	13,88	12,81
19	толуол	1,41	1,104
21	2-метилгептан	1,103	0,833
23	3-метилгептан	1,708	1,289
26	ксилол	1,0585	0,798

нологічного вузла процесу переганяння рафіна-ту бензольного виробництва на основі обраної моделі розрахунку процесу ректифікації та мо-

делі ЮНІФАК для розрахунку термодинамічної системи та фазової рівноваги даної багатокомпонентної суміші.

В результаті моделювання отримано технологічні, конструктивні та вартісні характеристики ректифікаційних колон, а також якісні та кількісні характеристики одержаних в результаті переганяння фракцій: легкої фракції петролейного ефіру, важкої фракції петролейного ефіру та бензину-розчинника для гумової промисловості, що повністю відповідають державним стандартам.

Доведено, що дві ректифікаційні колони по 12 тарілок, отримані в результаті моделювання в УМП ChemCad, дають аналогічний результат за якісними та кількісними показниками в порівнянні з двома колонами по 40 тарілок, що використовуються у діючих промислових виробництвах.

Таким чином, отримані результати дають змогу модернізувати обладнання шляхом зменшення кількості тарілок, що в свою чергу буде сприяти суттєвому скороченню часу експлуатації обладнання та витрат на здійснення технологічних процесів.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. *New and extended parameterization of the thermodynamic model AIOMFAC: calculation of activity coefficients for organic-inorganic mixtures containing carboxyl, hydroxyl, carbonyl, ether, ester, alkenyl, alkyl, and aromatic functional groups* / Zuend A., Marcolli C., Booth A.M., Lienhard D.M., Soonsin V., Krieger U.K., Topping D.O., McFiggans G., Peter T., Seinfeld J.H. // *Atmos. Chem. Phys.* – 2011 – Vol.11. – P.9155-9206.
2. *Wyczesany A.* Simulation of N-propanol dehydration process via heterogeneous azeotropic distillation using the NRTL equation // *Chem. Process Eng.* – 2017 – Vol.38. – P.163-175.
3. *Hinojosa-Gomez H., Barragan-Aroche J.F., Bazua-Rueda E.R.* A modification to the Peng–Robinson-fitted equation of state for pure substances // *Fluid Phase Equilib.* – 2010. – Vol.298. – P.12-23.
4. *Rabah A.A., Mohamed S.A.* A new three parameter cubic equation of state // *Scientia Iranica.* – 2010. – Vol.17. – No. 2. – P.177-184.
5. *Comparison of the prediction power of 23 generalized equations of state. P. I. Saturated thermodynamic properties of 102 pure substances* / Abdollahi-Demneh F., Moosavian M.A., Montazer-Rahmati M.M., Omidkhan M.R., Bahmaniar H. // *Fluid Phase Equilib.* – 2010. – Vol.288. – P.67-82.
6. *Chang E.I., Pankow J.F.* Organic particulate matter formation at varying relative humidity using surrogate secondary

and primary organic compounds with activity corrections in the condensed phase obtained using a method based on the Wilson equation // *Atmos. Chem. Phys.* – 2010 – Vol.10. – No. 12. – P.5475-5490.

7. *Viscosity of binary non-electrolyte liquid mixtures: prediction and correlation* / Kijevcanin M.Lj., Kostic V.Z., Radovic I.R., Dordevic B.D., Serbanovic S.P. // *Chem. Ind. Chem. Eng. Q.* – 2008 – Vol.14. – No. 4. – P.223-226.

8. Gerber R.P., Soares R.P. Assessing the reliability of predictive activity coefficient models for molecules consisting of several functional groups // *Brazilian J. Chem. Eng.* – 2013. – Vol.30. – No. 1. – P.1-11.

9. Ozmen D., Dramur U., Tatli B. Liquid-liquid equilibria of propionic acid - water - solvent (n-hexane, cyclohexane, cyclohexanol and cyclohexyl acetate) ternaries at 298.15 K // *Brazilian J. Chem. Eng.* – 2004 – Vol.21. – No. 4. – P.647-657.

10. Bilgin M. Isobaric vapour-liquid equilibrium data of the system isopropanol-methyl isobutyl ketone at (101.32, 66.67, and 40.00 ± 0.02) KPa // *Pamukkale Univ. J. Eng. Sci.* – 2002. – Vol.8. – P.103-108.

11. *Chromatographic isolation and spectroscopic identification of phytoconstituents of jujuba seeds (Zizyphus jujuba Mill.)* / M.M. Alam, A. Ali, M. Ali, S.R. Mir // *J. Pharm. Bioallied Sci.* – 2017. – Vol.9. – P.26-32.

Надійшла до редакції 24.04.2019

USING CHEMCAD SOFTWARE FOR SIMULATION OF THE PROCESS OF DISTILLATION OF BENZENE RAFFINATE TO PREPARE PETROLEUM SOLVENTS

I. Huzova

Lviv Polytechnic National University, Lviv, Ukraine

e-mail: iryna.o.huzova@lpnu.ua

The models of a technological line for the production of petroleum solvents were developed in this work. The choice of the module for calculating the rectification process (a distillation column, TOWER) was justified. The choice of the UNIFAC model for calculating the thermodynamic system and phase equilibrium of a multicomponent mixture was substantiated. By using ChemCad software, a model of the technological unit was developed for the distillation of raffinate in the production of benzene. A technological unit has been designed in which a light fraction of petroleum ether, a heavy fraction of petroleum ether and a gasoline solvent for the rubber industry were formed. The chemical composition of the fractions fully complies with the requirements of the state standards. Technological, constructive and cost characteristics of the distillation columns were ascertained and the qualitative and quantitative parameters of the fractions were determined and optimized. It was stated that two simulated distillation columns containing only 12 plates are equivalent to two distillation columns containing 40 plates that are currently used in production. The obtained results of the simulation, performed by means of the ChemCad software, allow upgrading the equipment, reducing the number of plates by three times and increasing the cost of equipment.

Keywords: petroleum ether; gasoline solvent; rectification; UNIFAC model; ChemCad software; simulation.

REFERENCES

1. Zuend A., Marcolli C., Booth A.M., Lienhard D.M., Soonsin V., Krieger U.K., Topping D.O., McFiggans G., Peter T., Seinfeld J.H. New and extended parameterization of the thermodynamic model AIOMFAC: calculation of activity coefficients for organic-inorganic mixtures containing carboxyl, hydroxyl, carbonyl, ether, ester, alkenyl, alkyl, and aromatic functional groups. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2011, vol. 11, pp. 9155-9206.

2. Wyczesany A. Simulation of N-propanol dehydration process via heterogeneous azeotropic distillation using the NRTL equation. *Chemical and Process Engineering*, 2017, vol. 38, pp. 163-175.

3. Hinojosa-Gomez H., Barragan-Aroche J.F., Bazua-Rueda E.R. A modification to the Peng-Robinson-fitted equation of state for pure substances. *Fluid Phase Equilibria*, 2010, vol. 298, pp. 12-23.

4. Rabah A.A., Mohamed S.A. A new three parameter cubic equation of state. *Scientia Iranica*, 2010, vol. 17, pp. 177-184.

5. Abdollahi-Demneh F., Moosavian M.A., Montazer-Rahmati M.M., Omidkhan M.R., Bahmaniar H. Comparison of the prediction power of 23 generalized equations of state: Part I. Saturated thermodynamic properties of 102 pure substances. *Fluid Phase Equilibria*, 2010, vol. 288, pp. 67-82.

6. Chang E.I., Pankow J.F. Organic particulate matter formation at varying relative humidity using surrogate secondary and primary organic compounds with activity corrections in the condensed phase obtained using a method based on the Wilson equation. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2010, vol. 10, pp. 5475-5490.

7. Kijevcanin M.Lj., Kostic V.Z., Radovic I.R., Dordevic B.D., Serbanovic S.P. Viscosity of binary non-electrolyte liquid mixtures: prediction and correlation. *Chemical Industry and Chemical Engineering Quarterly*, 2008, vol. 14, pp. 223-226.

8. Gerber R.P., Soares R.P. Assessing the reliability of predictive activity coefficient models for molecules consisting of several functional groups. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 2013, vol. 30, pp. 1-11.

9. Ozmen D., Dramur U., Tatli B. Liquid-liquid equilibria of propionic acid - water - solvent (n-hexane, cyclohexane, cyclohexanol and cyclohexyl acetate) ternaries at 298.15 K. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 2004, vol. 21, pp. 647-657.

10. Bilgin M. Isobaric vapour-liquid equilibrium data of the system isopropanol-methyl isobutyl ketone at (101.32, 66.67, and 40.00 ± 0.02) KPa. *Pamukkale University Journal of Engineering Sciences*, 2002, vol. 8, pp. 103-108.

11. Alam M.M., Ali A., Ali M., Mir S.R. Chromatographic isolation and spectroscopic identification of phytoconstituents of jujuba seeds (Zizyphus jujuba Mill.). *Journal of Pharmacy & Bioallied Sciences*, 2017, vol. 9, pp. 26-32.