

内部热耦合精馏塔数学模型及数值解法¹⁾

刘兴高 马龙华 钱积新

(浙江大学系统工程研究所, 杭州玉泉 310027)

摘要 内部热耦合精馏塔是精馏塔节能研究的前沿, 首次建立了操作优化的数学模型, 并给出了相应的数值解法. 以苯-甲苯物系作为实例进行了优化研究, 结果表明了该数学模型和数值解法的有效性.

关键词 热耦合精馏, 数学模型, 数值解法, 优化.

1 引言

内部热耦合精馏塔 (ITCDIC) 是目前精馏塔节能研究的一个前沿. 热耦合通过两段之间的热交换来实现, 为了使精馏段的热量向提馏段传递, 精馏段工作在比提馏段高的压力和温度下, 为了调整工作压力, 一个压缩机和一个节流阀被安排在两部分之间; 冷凝器和再沸器的热负荷被降低, 大量的能量被再利用, 从而大幅度地降低了能耗, 具有巨大的经济和社会价值^[1,2].

由于 ITCDIC 过程结构中高度耦合的存在增加了过程模型的复杂程度和病态程度, 从而增加了过程建模和模型求解的困难. 目前, 尚未见道有关 ITCDIC 操作优化的研究文献报道. 本文给出了一个 ITCDIC 过程操作优化的数学模型, 同时采用简约方程联立的序列二次规划 (SQP) 方法进行了数值求解, 实例研究结果表明了该数学模型和数值解法的有效性, 得到了 ITCDIC 过程的最优操作参数.

2 数学模型

操作优化数学模型的推导应用了能量守恒、总质量守恒、组分守恒、汽液平衡等原理. 并进行了以下假设: 忽略塔板上的持汽量, 持液量保持恒定; 忽略塔内压降; 忽略热损失和精馏段、提馏段的热容变化; 每层塔板上汽液充分混合, 温度和浓度分布均一; 每层塔板上汽液保持平衡; 相对挥发度保持不变.

● 优化目标

选择精馏段的压强 P_r 和进料热状况 q , 进料组成 Z_f , 传热速率 UA , 作为主要的操作参数进行稳态优化. 优化的目的在于找到最佳的稳态操作参数, 使内部热耦合精馏过程在满足生产产品质量约束下达到最大的优化目标值. 系统的节能百分率, X_s , 比热力学效率上升百分率, X_e , 更直观地反映系统的节能效果 (定义见下面式子). 因此, 可以选择节能百分率, 作为 ITCDIC 设计参数的一个优化目标.

● 等式约束

定义 X_e 为 ITCDIC 的热力学效率与 CDIC 最大热力学效率相比较上升的百分率; X_s 为 ITCDIC 的能耗与 CDIC 最小回流比下的能耗相比较节能的百分率. 从热力学、质量能量守恒角度, 对理想物系得到如下的能量衡算基准方程

1) 国家环保局中日合作项目“在石油企业进行节能及减轻环境负荷的研究”(环科科, 1997, 006 号文, 项目 14).

收稿日期 2000-02-18 收修改稿日期 2000-04-16

$$X_e = (E_{tcd} - E_{rmin,con}) / E_{rmin,con} \quad (1)$$

$$X_s = (Q_{rmin,con} - Q_{tcd}) / Q_{rmin,con} \quad (2)$$

$$E_{tcd} = W_{min} / Q_{tcd} \quad (3)$$

$$E_{rmin,con} = W_{min} / Q_{rmin,con} \quad (4)$$

$$W_{min} = FRT \sum (X_{fi} \ln X_{fi}) \quad (5)$$

$$Q_{tcd} = F(1-q)\Delta H_{f,v} + W_{comp} \quad (6)$$

$$W_{comp} = V_f K / (K-1) RT_1 ((P_2 / P_1)^{(K-1)/K} - 1) \quad (7)$$

$$1 / (K-1) = \sum (Y_i / (K_i - 1)) \quad (8)$$

$$Q_{rmin,con} = F(1-q)\Delta H_{f,v} + [(R_{min} + 1)D - F(1-q)]\Delta H_{b,v} \quad (9)$$

热耦合方程 (参见文献 [3, 4])

$$Q_j = UA (T_j - T_{j+f-1}) \quad j=1, \dots, f-1 \quad (10)$$

$$T_j = b / (a - \ln P_{vp,ij}) - c \quad (11)$$

$$P_{vp,ij} = P \alpha_i / \sum_{i=1}^c \alpha_i X_{ij} \quad (12)$$

质量平衡方程

$$L_j = \sum_{k=1}^j Q_k / \lambda \quad j=1, \dots, f-1 \quad (13)$$

$$L_{f+j-1} = L_{f-1} + Fq - \sum_{k=1}^j Q_k / \lambda \quad j=1, \dots, f-2 \quad (14)$$

$$Ln = F - V_1 \quad (15)$$

$$V_1 = F(1-q) \quad (16)$$

$$V_{j+1} = V_1 + L_j \quad j=1, \dots, f-1 \quad (17)$$

$$V_{f+j} = V_f F(1-q) - \sum_{k=1}^j Q_k / \lambda \quad j=1, \dots, f-2 \quad (18)$$

汽液平衡方程

$$Y_{ij} = \alpha X_{ij} / \sum_{i=1}^c \alpha_i X_{ij} \quad (19)$$

组分平衡方程

$$V_2 Y_{i2} - V_1 Y_{i1} - L_1 X_{i1} = 0 \quad (20)$$

$$V_{j+1} Y_{ij+1} - V_j Y_{ij} + L_{j-1} X_{ij-1} - L_j X_{ij} = 0 \quad j=2, \dots, n-1 \text{ and } j \neq f \quad (21)$$

$$V_{f+1} Y_{if+1} - V_f Y_{if} + L_{f-1} X_{if-1} - L_f X_{if} + FZ_{if} = 0 \quad (22)$$

$$-V_n Y_{in} + L_{n-1} X_{i,n-1} - L_n X_{in} = 0 \quad (23)$$

● 不等式约束

ITCDIC 参数优化的不等式约束主要包含四个方面: 产品质量约束, 分离效果约束, 操作条件约束, 可行组成解的约束. 由于生产对产品质量往往有不同的要求, 不同产品质量要求下的优化目标值, 比如能量节省百分率和操作费用等, 往往不同. 因此, 必须指定产品质量约束条件, 比如对控制组分

$$Y_1 \geq 96\%, \quad X_n \leq 5\% \quad \text{或者是} \quad Y_1 \geq 98\%, \quad X_n \leq 4\% \quad (24)$$

对于总的分离效果, 有:

$$FZ_{if} \geq V_1 Y_{i1} \quad (25)$$

指定优化域, 比如

$$0.1013 \text{MPa} \leq Pr \leq 1.013 \text{Mpa} \quad (26)$$

$$0 \leq q \leq 1 \quad (27)$$

$$7500 \text{ W.K}^{-1} \leq UA \leq 10500 \text{ W.K}^{-1} \quad (28)$$

$$0.2 \leq Z_{ij} \leq 0.8 \quad (29)$$

指定可行组成解的约束

$$0 \leq X_{ij} \leq 1 \quad (30)$$

$$0 \leq Y_{ij} \leq 1 \quad (31)$$

式 1~32 构成 ITCDIC 操作优化数学模型, 可以用下面总的模型 (TCDOPT) 来描:

$$\begin{aligned} \max. \quad & f(Pr, q, UA, Z_j) = X_s \quad (\text{TCDOPT}) \\ \text{s.t.} \quad & \text{稳态过程等式约束, 式 1~23} \\ & \text{不等式约束, 式 24~31} \end{aligned}$$

数学模型 TCDOPT 是一个非线性规划的约束优化问题. 优化算法采用简约方程联立的 SQP 方法^[5].

3 实例研究

以苯-甲苯体系的分离作为实例进行研究. 考虑 30 块塔板的 ITCDIC, 详细的操作情况如下: 塔板数, 30; 进料板, 16; 进料流率, 100 kmol·h⁻¹; 进料组成, 苯 (甲苯), 0~1 (0~1); 进料热状况, 0~1; 精馏段压强, 0.1013~1.013MPa; 提馏段压强, 0.1013MPa; 传热速率, 9803 W·K⁻¹; 相对挥发度, 2.317. 绝热指数的计算用到理想气体热容方程, 仿真中物理量的取值见表 1.

表 1 仿真中用到的物性数据

	安东尼常数			理想气体热容参数			
	a	b	c	A	B	C	D
苯	15.9008	2788.51	-52.36	-8.101	-5.817	-7.206×10 ⁻⁵	1.703×10 ⁻⁸
甲苯	16.0137	3096.52	-53.67	1.133×10 ⁻¹	1.224×10 ⁻¹	-6.605×10 ⁻⁵	1.173×10 ⁻⁸

表 2 是苯-甲苯物系当产品质量要求为 $Y_1 \geq 96\%$ 、 $X_n \leq 5\%$, 操纵变量精馏段的压强 P_r 和进料热状况 q , 和扰动变量, 进料组成 Z_j , 传热速率 UA , 作为优化参数进行优化时, 所得到的 ITCDIC 系统的最大节能潜力和相应的最优操作参数.

表 2 最大节能效果

列项	优化域 1	优化域 2	优化结果 1	优化结果 2
质量指标				
$Y_1, \%$	≥ 96	≥ 96	96.53	96.16
$X_n, \%$	≤ 5	≤ 5	5	5
操作参数				
P_r, MPa	0.1013~1.013	0.1013~1.013	0.2633	0.2560
q	0~1	0~1	0.6176	0.6709
$UA, \text{W}\cdot\text{K}^{-1}$	7500~10500	8500~10500	10500	10500
Z_j	0.4~0.6	0.35~0.55	0.4	0.35
优化目标				
$X_s, \%$	最大值	最大值	58.03	60.83

表 2 的最大节能潜力优化结果表明 ITCDIC 过程可以比 CDIC 最小回流比下的能耗节能 60% 左右, 这一节能潜力是惊人的; 从 Z_j 的优化域可以看出, 随着 Z_j 下降分离难度增加, ITCDIC 过程更加节能; 从 UA 的优化域可以看出, 最优节能效果下的 UA 取值为优化域的最大值说明, UA 越大对 ITCDIC 过程越有利, 这与理论上的分析结果是一致的, 因为, 从理论上 UA 越大传热效果越好热耦合情况越好对 ITCDIC 分离越有利同等分离效果下 ITCDIC 过程越节能; 要想节能最优, 塔顶最优组成不能采用简单的卡边控制.

表 2 压强 P_r 的优化域可以看出, 对苯-甲苯物系 ITCDIC 过程的压强最优值在 2~3 个大气压左右. 当不在最优操作时, 压强 P_r 越大则过程节能效果越差; 这与理论上的分析结果也是一致的, 因为从理论上来说, P_r 提供过程必需的推动力, P_r 越大对 ITCDIC 分离越有利, 但是压缩机的能耗越大, 从而节能效果减小, 显然, 当达到分离要求后, P_r 越大能耗越大. 分离效果和过程能耗总是一对矛盾.

4 结束语

本文所建立的 ITCDIC 过程理想物系操作优化的数学模型具有通用性, 不仅适用于二元物系而且适用于多元物系. 开发出了相应的过程优化软件, 通过数值仿真可直接得到过程操作的最优设计参数和最大节能潜力. 对苯-甲苯物系的实例研究表明了该数学模型和仿真方法的有效性, 同时得到了该物系的系列优化结果.

符号标注

E —— 热力学系数	Y —— 汽相摩尔分率
F —— 进料流率, $\text{mol}\cdot\text{s}^{-1}$	Z_f —— 进料摩尔分率
K —— 气体绝热指数	$\Delta H, \Delta S$ —— 焓、熵变化
L —— 液相流率, $\text{kmol}\cdot\text{s}^{-1}$	α —— 相对挥发度
P_{vp} —— 饱和蒸汽压, Mpa	λ —— 汽化潜热
P —— 精馏(提馏)段压强 $P_r(P_s)$, MPa	下角标
q —— 进料热状况	comp —— 压缩机
Q —— 耗能, W	con —— 常规精馏塔
R_{min} —— 最小回流比	f —— 进料板
UA —— 传热速率, $\text{W}\cdot\text{K}^{-1}$	i —— 组分
V —— 汽相流率, $\text{mol}\cdot\text{s}^{-1}$	j —— 塔板数
W —— 热力学功, W	min —— 最小值
X —— 液相摩尔分率	rmin —— 最小回流比
X_e —— 热力学效率上升百分率, %	tcd —— ITCDIC
X_s —— 能量节省百分率, %	

参 考 文 献

1. Liu Xingao, Qian Jixin. Modeling, control and optimization of ideal internal thermally coupled distillation columns. *Chem. Eng. & Technol. (English)*, 2000, 23, 235~241
2. Takamatsu T, Lueprasitsakul V, Nakaiwa M. Modeling and design method for internal heat integrated packed distillation column. *J. Chem. Eng. Japan*, 1988, 21(6), 595~601
3. Mah R, Nicholas J, Wodnik R. Distillation with secondary reflux and vaporization: a comparative evaluation. *AIChE J.*, 1977, 23(5), 651~658
4. Lestak, F.; Smith, R.; Dhole, V. R., Heat transfer across the wall of dividing wall columns, *Trans. IChemE.*, 1994, 72(A9), 639~644
5. 刘兴高. 内部热耦合精馏塔的建模与优化. 浙江大学博士学位论文

刘兴高 男, 1968 年生. 1991 年毕业于天津大学化学工程专业, 1997 年获浙江大学化学工程专业硕士学位, 已获浙江大学工业控制技术研究所控制理论与控制工程专业博士学位. 主要研究方向为复杂工业过程的建模、控制与优化, 通用精馏塔系的模拟与优化, 化工过程的分析与综合. Email 址: liuxinggao@yahoo.com.

马龙华 男, 1965 年生. 1986 年毕业于兰州铁道学院工业电器自动化专业, 1993 获浙江大学工控所工业自动化专业硕士学位, 1997 至今在浙江大学工控所攻读博士学位. 主要研究方向为过程控制、水厂综合自动化.

钱积新 男, 1939 年生. 1963 年毕业于清华大学电机系工业企业电气化与自动化专业. 现为浙江大学教授、博士生导师, 系统工程研究所所长. 研究领域为复杂工业过程的建模、控制与优化, 系统科学和系统工程, 控制系统的分析与综合.