

## 信息技术应用

# 变压精馏分离异丁醇-乙酸异丁酯 工艺模拟

刘艳杰,王桂英,潘高峰,戴传波\*

(吉林化工学院石油化工学院,吉林 吉林 132022)

**摘要:**基于异丁醇-乙酸异丁酯共沸体系的特性分析,提出了建立变压精馏过程分离异丁醇-乙酸异丁酯的工艺方法。利用 Aspen Plus 模拟软件,以产品异丁醇和乙酸异丁酯质量分数为约束变量,过程能耗最低为目标函数,对该体系进行了工艺模拟与优化,考察了理论板数、进料位置、回流进料比等参数对分离效果的影响。结果表明最优条件为:减压塔操作压力 20 kPa,理论塔板数 60,进料位置 30,回流比 8.5;常压塔操作压力 100 kPa,理论塔板数 30,进料位置 22,回流比 5。在此条件下,得到质量分数不低于 0.998 的异丁醇和乙酸异丁酯产品,回收率均达到 99.9% 以上。

**关键词:**异丁醇;乙酸异丁酯;共沸体系;变压精馏;模拟

**中图分类号:**TQ028.13

**文献标志码:**A

**文章编号:**0253-4320(2017)12-0182-04

**DOI:**10.16606/j.cnki.issn 0253-4320.2017.12.044

## Optimization of separation process for isobutanol and isobutyl acetate by pressure swing distillation

LIU Yan-jie, WANG Gui-ying, PAN Gao-feng, DAI Chuan-bo\*

(Institute of Petrochemical Technology, Jilin Institute of Chemical Technology, Jilin 132022, China)

**Abstract:** The pressure swing distillation process for separation of isobutanol and isobutyl acetate is proposed on the basis of carrying out characteristics analysis on the isobutanol-isobutyl acetate azeotropic system. The optimization and simulation on this system are performed by using Aspen Plus simulation software, aiming at minimizing the energy consumption with the concentrations of isobutanol and isobutyl acetate products as constraint variables. The influences of total number of theoretical plate, reflux ratio, feeding position and other parameters on the separation efficiency are specified. The optimal operation parameters for the vacuum distillation tower are as follows: the operating pressure is 20 kPa, the number of theoretical plate is 60, the feeding position is at the 30th plate, and the reflux ratio is 8.5. The optimal operation parameters for the atmospheric distillation tower are as follows: the operating pressure is 100 kPa, the number of theoretical plate is 30, the feeding position is at the 22nd plate, the reflux ratio is 5. Under the optimal parameters, the mass fractions of both isobutanol and isobutyl acetate products exceed 0.998, and the yields are both more than 99.9%.

**Key words:** isobutanol; isobutyl acetate; azeotropic system; pressure swing distillation; simulation

在常温下,异丁醇(IBA)与乙酸异丁酯(IBAC)均为液体,且二者属于共沸物系<sup>[1]</sup>,采用常规精馏方法有效地分离存在一定难度。对于共沸物的分离常采用共沸精馏<sup>[2-4]</sup>、萃取精馏<sup>[5-7]</sup>、加盐萃取精馏<sup>[8-9]</sup>等方法,但这些方法必须有质量分离剂的作用方可实现,这势必存在质量分离剂的选择困难,且不易回收提纯、分离过程能耗大、产品纯度低等缺点。对于二元共沸混合物,当共沸组成随着压力变化比较敏感时,变压精馏是分离共沸物的有效方法<sup>[10-13]</sup>。本文中通过对 IBA-IBAC 共沸体系的特性分析,建立分离 IBAC-IBA 共沸物的变压精馏工艺流程。运用 Aspen Plus 软件,在保证 IBAC 和 IBA 回收纯度要求的条件下,模拟优化变压精馏工艺流

程的工艺操作参数,为 IBA-IBAC 共沸物系分离提出可行的分离工艺路线,研究结果对工业生产具有一定指导意义。

## 1 分离任务

待分离原料液处理量为 1 000 kg/h,进料温度为 30℃,原料液含 40% 的 IBAC 和 60% 的 IBA,生产工艺规定分离后 IBAC 和 IBA 质量分数均达到 99.8% 以上。

## 2 分离流程建立

### 2.1 热力学模型选择

IBA-IBAC 属于非理想性物系,且二者完全互

收稿日期:2017-05-16

基金项目:吉林省重点科技攻关资助项目(20170204009GX)

作者简介:刘艳杰(1969-),女,教授,研究方向为化工过程产品开发与化工过程模拟,yanjieliu2009@126.com;戴传波(1972-),男,教授,研究方向为化工过程开发,通讯联系人,0432-62185150,daichb@163.com。

溶,利用 Aspen Plus 模拟软件,选用不同热力学模型,在常压条件下,对 IBA-IBAC 二元共沸物系进行共沸数据的计算,计算结果见表 1。由表 1 可见,UNIFAC 热力学模型的计算结果与文献[1]给出的 IBA-IBAC 共沸组成数据偏差最小,因此,选用 UNIFAC 热力学模型作为该体系的过程模拟计算热力学模型可提供可靠的理论依据。

表 1 不同热力学模型共沸数据的计算值

热力学模型	共沸组成(质量分数)		共沸温度/℃
	IBA	IBAC	
Willson	0.8049	0.1951	107.45
UNIQUAC	0.8076	0.1924	107.45
UNIFAC	0.5729	0.4271	105.41

### 2.2 变压精馏可行性分析

表 2 为 5 个不同压力下 IBA 和 IBAC 共沸点计算数据,由表 2 可见,在考察压力条件下,IBA 与 IBAC 均存在二元共沸物,且随压力的增大,IBA-IBAC 共沸物中 IBAC 的质量分数呈现明显减小趋势,即共沸组成对压力变化非常敏感。考察任意 2 个压力条件下,共沸组成变化均超过 5%,所以采用变压精馏分离 IBA-IBAC 二元共沸物是完全可行的<sup>[12-13]</sup>。

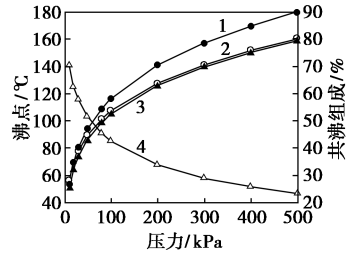
表 2 不同压力下 IBA-IBAC 共沸点计算数据

压力/kPa	共沸温度/℃	共沸组成(IBAC 质量分数)
20	65.02	0.6248
50	86.58	0.5146
100	105.13	0.4271
300	139.92	0.2908
500	159.12	0.2353

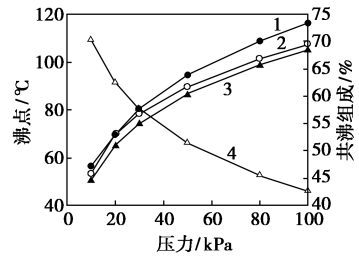
### 2.3 操作压力选择

在变压精馏操作中,两塔操作压力确定是有效实现变压精馏的关键,操作压力决定着变压精馏的分离效果,同时,决定着分离操作的成本。图 1 为 IBA-IBAC 体系在 20~500 kPa 组分沸点和共沸温度曲线。由图 1 可见,随压力的增大,IBA 沸点与 IBA-IBAC 共沸温差越小,在 100、500 kPa 时,温差分别为 2.20、0.75℃;可见,在正压条件下精馏分离 IBA 与 IBA-IBAC 共沸物比较困难;而 IBAC 沸点与 IBA-IBAC 共沸温度差随压力的增大呈现增大趋势,在 20、100 kPa 时,温差分别为 4.8、10.8℃,可见,在负压条件下,容易实现 IBAC 与 IBA-IBAC 共

沸物的精馏分离。结合工艺过程设计要求,为降低设备成本,在保证精馏容易操作控制的前提下,应采用常压与减压联合操作实现 IBA-IBAC 共沸物的精馏分离。通过对图 1 的分析,本研究操作压力应选择 100、20 kPa。



(a)



(b)

1—IBAC 沸点;2—IBA 沸点;3—二元共沸温度;  
4—共沸组成(IBAC)

图 1 不同压力下 IBA-IBAC 沸点和共沸点

### 2.4 分离序列建立

对给定组成的 IBA-IBAC 混合物建立减压-常压变压精馏工艺流程,见图 2。该工艺流程由 2 个操作压力不同的精馏塔组成,即减压塔(T0101)和常压塔(T0102)。原料混合物 F 首先进入 T0101,塔顶蒸出减压条件下 IBA-IBAC 的共沸物 D1,塔底得到高纯度 IBA 产品 W1;来自 T0101 的共沸物 D1 在 T0102 继续精馏,塔顶蒸出常压条件下 IBA-IBAC 的共沸物 D2,该共沸物返回 T0101 与原料混合物 F 混合后进入 T0101 继续精馏,通过调节 D2 流量、两塔操作参数和塔釜采出量等参数,塔底得到高纯度 IBAC 产品 W2。

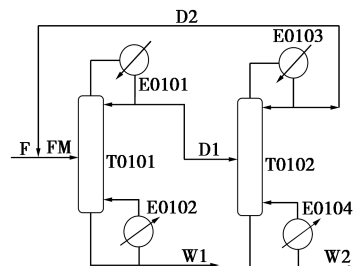


图 2 变压精馏工艺流程

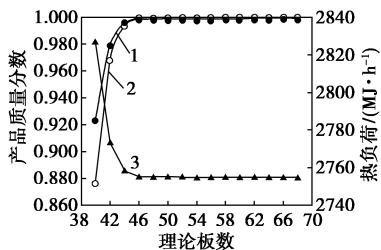
### 3 模拟计算

首先,采用 Aspen Plus 软件 DSTWU 模型,完成给定任务下 T0101 和 T0102 的简捷计算。然后,以简捷计算得到的理论板数、最小回流比和适宜进料位置等参数为基础数据,采用 RadFrac 模型、Design Specs 完成 T0101 和 T0102 核算,以保证产品达到生产工艺分离要求。最后,采用 Sensitivity 灵敏度分析工具,以 IBA 和 IBAC 的纯度为约束变量,过程能耗最低为目标函数,完成各精馏塔工艺参数的优化。在给定分离任务下,本文中详细对减压塔进行模拟优化与分析。

## 4 结果与讨论

### 4.1 理论板数对产品质量的影响

图 3 为理论板数与产品质量和再沸器热负荷的关系曲线,由图 3 可见,IBA 和 IBAC 产品质量分数随理论板数增加而增大。但当理论板数增至 60 块时,IBA 和 IBAC 质量分数分别达到 0.998 5、0.999 2,但随理论板数的继续增加,2 产品的质量分数虽呈继续增加趋势,但增加幅度很小,同时,随着理论板数的增加,再沸器热负荷降低幅度也很小。在保证产品质量的条件下,综合考虑操作费用和设备投资,理论塔板数选择 60 块为宜。

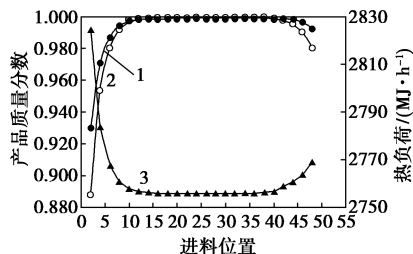


1—产品 IBA;2—产品 IBAC;2—再沸器热负荷

图 3 理论板数对分离效果的影响

### 4.2 进料位置对产品质量的影响

图 4 为进料位置与产品质量和再沸器热负荷的关系曲线,由图 4 可见,进料位置对 IBA 和 IBAC 产品质量分数有很大的影响。当进料位置在 26~34 块板时,IBA 和 IBAC 质量分数分别达到 0.998 6、0.999 3,随进料位置的下移,2 产品的质量分数呈下降趋势,当进料位置下移至 40 以下时,IBA 和 IBAC 质量分数明显下降,同时,再沸器热负荷呈增大趋势。在保证产品质量的条件下,综合考虑操作费用,进料位置选择在 26~34 块板为宜,本研究计算取 30 块板。

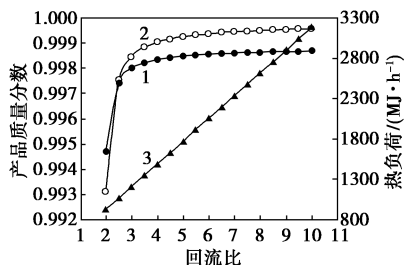


1—产品 IBA;2—产品 IBAC;2—再沸器热负荷

图 4 进料位置对分离效果的影响

### 4.3 回流比对产品质量的影响

图 5 为回流比与产品质量和再沸器热负荷的关系曲线,由图 5 可见,随回流比的增大,IBA 和 IBAC 产品质量分数和热负荷均呈逐渐增大趋势。当回流比在 7.5~9.0 时,IBA 和 IBAC 质量分数分别达到 0.998 6、0.999 3,但随回流比的继续增大,2 产品质量分数增加幅度不大,而再沸器热负荷呈增大趋势。在保证产品质量的条件下,综合考虑操作费用,回流比选择在 7.5~9.0 为宜,本研究计算取 8.5。



1—产品 IBA;2—产品 IBAC;2—再沸器热负荷

图 5 回流比对分离效果的影响

### 4.4 优化工艺参数

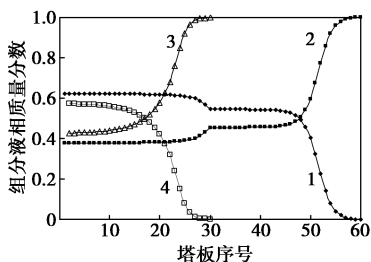
采用前述方法对图 2 所示工艺流程中 T0102 进行工艺参数的模拟分析,得到优化工艺参数见表 3。

表 3 模拟优化参数

精馏塔	操作压力/kPa	理论板数	进料位置	回流比
T0101	20	60	30	8.5
T0102	100	30	22	5

在表 3 优化工艺参数下,T0101 和 T0102 塔内组分液相组成分布见图 6。由图 6 可见,在 T0101 塔内,从塔顶到塔底产品 IBA 的组成呈逐渐升高趋势,至塔釜近似达到 0.999,而 IBAC 的组成呈逐渐降低趋势,至塔釜近似为 0,在 T0101 塔顶蒸出近似 20 kPa 条件下 IBA-IBAC 的共沸物。在 T0102 塔内,从塔顶到塔底产品 IBAC 的组成呈逐渐升高趋势,至塔釜近似达到 0.999,而 IBA 的组成呈逐渐降

低趋势,至塔釜近似为0,在T0102塔顶蒸出近似100 kPa条件下IBA-IABC的共沸物。由此可见,IBAC与IBA在两塔内的组成分布特征进一步证实了采用变压精馏工艺完全可以实现IBAC与IBA共沸物的有效分离。



1—T0101 IBAC;2—T0101 IBA;3—T0102 IBAC;4—T0102 IBA

图6 塔内组分液相组成分布

## 5 结论

(1)通过对IBA-IABC共沸物系与压力关系的特性分析,在给定分离任务下,建立有效分离IBA-IABC共沸物的减压-常压的变压精馏工艺流程。

(2)应用Aspen Plus模拟软件,以产品IBA和IABC质量分数为约束变量,过程能耗最低为目标函数,对分离IBA-IABC共沸物的变压精馏工艺流程进行模拟分析与优化,得到优化操作参数。在此条件下,可得到质量分数不低于0.998的IBAC和IBA产品,且二者回收率均达到99.9%以上,实现了IBAC-IBA共沸物的高纯度分离。研究结果可为共沸物分离的工艺设计提供理论依据。

## 参考文献

- [1] 程能林.溶剂手册[M].4版.北京:化学工业出版社,2008:378.
- [2] 胡鸿宾,宋红荣,叶庆国.共沸精馏回收正丁醇的模拟与优化[J].青岛科技大学学报:自然科学版,2011,12(6):614-616.
- [3] 熊帅,华超,宁国庆,等.共沸精馏分离烯丙醇-水的工艺模拟及优化[J].计算机与应用化学,2016,33(7):735-740.
- [4] 陈勇攀,于洋,白鹏.共沸精馏分离丙炔醇-丁炔二醇-水的模拟及优化[J].现代化工,2014,34(3):139-142.
- [5] 曹慧斌,王洪海,李春利,等.乙酸甲酯-甲醇-水的热集成萃取精馏工艺[J].现代化工,2017,37(4):148-153.
- [6] 赵锦波,冯微,顾正桂,等.萃取精馏分离叔丁醇-异丙醇-水共沸体系的研究与优化[J].计算机与应用化学,2015,32(12):1421-1424.
- [7] 刘艳杰,潘高峰,王桂英,等.萃取精馏分离乙酸甲酯-甲醇共沸物的模拟研究[J].青岛科技大学学报:自然科学版,2015,36(6):635-639.
- [8] 王洪海,李春利,方静,等.加盐萃取精馏制取无水乙醇过程的模拟[J].石油化工,2008,37(3):258-261.
- [9] 赵林秀,王小燕,崔建兰,等.加盐萃取精馏分离醋酸甲酯-甲醇二元恒沸物[J].石油化工,2005,34(2):144-147.
- [10] 韩祯,李宏达,高鑫,等.乙酸异丙酯-异丙醇物系的热集成变压精馏分离模拟[J].石油化工,2015,44(6):663-668.
- [11] 曹玉娟,刘兴振,魏亿萍,等.热集成变压精馏分离甲基异丁基酮/正丁醇共沸物的动态控制[J].能源化工,2016,37(1):48-54.
- [12] Lee Jihwan, Cho Jungho, Kim Dong Min, et al. Separation of tetrahydrofuran and water using pressure swing distillation: Modeling and optimization [J]. Korean Journal of Chemical Engineering, 2011, 28(2): 591-596.
- [13] 刘家祺.分离过程[M].北京:化学工业出版社,2001:135-136. ■

## 浙江力普“卧式粉碎分级一体机”获国家专利

日前,国家高新技术企业、中国粉碎技术领航者浙江力普粉碎设备有限公司研发的“一种卧式粉碎分级一体机”获得国家专利(专利号:ZL201620996058.0)。该实用新型专利能一步完成粉碎和分级的工艺,且采用卧式分级轮设计,增大了分级室的空间,从而提高了分级的精度,使生产成本降低、产品细度质量增加。

据力普公司技术人员介绍,现有的粉碎分级一体机,虽然实现了粉碎和分级的整合,但分级轮为立式结构,竖直放置于粉碎盘上方,由于分级空间狭小受粉碎气流影响大,造成分级精度不理想,粗粉含量过多造成产品质量不合格。针对这种缺陷,该公司科研人员进行了一系列的技术改进:在粉碎机上部设有卧式涡轮分级机,将卧式涡轮分级机包括分级箱体、分级室、分级轮、出料口和分级电机,分级箱体与粉碎机的上箱体连通,分级轮采用卧式结构;立式式粉碎机包括竖向设置的粉碎轴承总成、与粉碎轴承总成的一端

连接的粉碎电机以及固定于粉碎轴承总成的另一端的粉碎转子件,进料口设置于上箱体的侧壁上;分级电机采用高精度涡轮分级电机;出料口横向设置并与分级室连通;进而一步完成粉碎和分级的工序,提高分级精度、降低能耗。

浙江力普立足自身拥有的粉碎设备特色技术领域优势,以专利特色技术构建产品链,积极打造粉碎设备行业名牌产品,开发出行业领先、拥有20多项国家专利的系列新产品如纳米碳酸钙分散粉碎生产线,石墨粉碎球形化成套设备,黄原胶、瓜尔胶精细粉碎以及精制棉制备纤维素醚的粉碎加工技术设备等,以特色优势专利产品成功抢占粉碎设备高端市场;“力普高科”牌粉碎设备获评绍兴名牌产品,跻身成为我国粉碎设备行业屈指可数的名牌产品之一。目前,浙江力普已成为国内知名的专业生产各类超细粉碎、精细分级成套粉体设备的国家高新技术企业、浙江省优秀创新型型企业。(丁文)