

间歇精馏 Aspen 模拟过程初始化条件优化的研究

艾波, 王传昌, 许保云*

(上海化工研究院有限公司精细化工研究所, 上海 200062)

摘要:为了减小 Aspen 模型模拟间歇精馏过程初始参数设置不准确带来的模型误差,使模型优化间歇精馏操作参数更加合理,提出了采用均匀设计的试验安排方法,并以桃醛粗品小试实验分离桃醛为研究对象,对 Aspen 模型模拟间歇精馏时的初始参数如理论板数、冷凝器持液量和每块理论板持液量进行优化。经过优化后得到理论板数为 35 块,冷凝器持液量为 0.005 2 kg,每块理论板持液量是 0.000 8 kg,参数更加接近实际精馏塔的理论参数,为后续的操作参数优化减少误差。

关键词: Aspen 模型; 间歇精馏; 初始参数; 均匀设计; 优化

中图分类号: TQ028

文献标志码: A

文章编号: 0253-4320(2017)12-0190-03

DOI: 10.16606/j.cnki.issn.0253-4320.2017.12.046

Optimization of initialization conditions in Aspen simulation process for batch distillation

AI Bo, WANG Chuan-chang, XU Bao-yun*

(Fine Chemical Institute, Shanghai Research Institute of Chemical Industry Co., Ltd., Shanghai 200062, China)

Abstract: In order to reduce the model error caused by the inaccurate initial parameter setting in simulating batch distillation process by Aspen model and make the batch distillation operation parameters in model optimization more reasonable, the test arrangement by uniform design method is proposed. Taking the separation experiment of crude peach aldehyde as the research object, the initial parameters for simulation of batch distillation by Aspen model such as the number of theoretical plates, the liquid holdups in condenser and on each theoretical plate are optimized. After optimization, the number of theoretical plates is 35, the liquid holdup in condenser is 0.005 2 kg and the liquid holdup on each theoretical plate is 0.000 8 kg. These parameters are closer to the theoretical parameters of actual distillation column, which is helpful to reduce error in the subsequent optimization of the operating parameters.

Key words: Aspen model; batch distillation; initial parameters; uniform design; optimization

间歇精馏作为一种传统的精馏方式,近年来随着精细化工和医药化工等行业的发展,逐步得到国内外专业学者的重视。由于间歇精馏过程的操作灵活性和适用性强的特点,被广泛地应用于小批量、多组分、多产品和高附加值产品的分离提纯中^[1-4]。但是在精细化工和医药化工中待分离物系很复杂,组成少则十几种,多则达到几十种。Aspen 软件对其进行工业模拟计算时,由于软件本身的局限性^[5],包括物性数据库不完全,组分太多导致模型计算很难收敛等,就要对待分离物系进行组分合理简化和物质物性估算,需要用实验验证其准确性,所以在模拟间歇精馏实验过程中涉及一些初始参数的确定,这些参数能够体现小试实验精馏塔在进行分离过程时的固定参数情况,比如理论板数、冷凝器持液量和单块理论板持液量,这些参数能否反映精馏塔操作情况直接关系到模拟结果的正确性^[6-7]。

本文中提出采用均匀设计方法,对模拟精馏塔

操作过程的初始条件进行优化,通过 DPS 数据处理系统处理数据,建立数学模型,得到最佳初始参数组合,能够使模型建立过程与实际间歇精馏过程更加吻合。并以单体香料桃醛的实验分离提纯为案例,研究该方法对模型初始条件的优化效果,为今后工业模拟计算提供一种优化初始参数的方法,确保工业设计和操作参数优化的准确性。

1 Aspen 模型的建立及实验研究

1.1 Aspen 模型的建立

模拟桃醛粗品体系分离提纯桃醛过程所采用的是商业流程模拟软件 Aspen Plus 中的 BatchFra 模块,在模拟过程中对模型做相应简化^[8]:①模型中的塔板为理论板数;②每块理论板数上的液体持液量恒定且相等,蒸汽持液量忽略不计;③等摩尔流量假设;④体系中各组分对基础组分的相对挥发度全塔恒定。

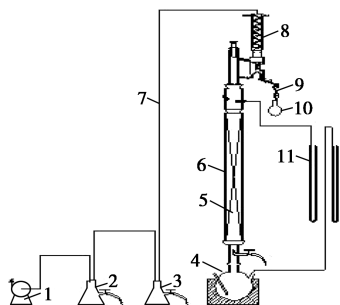
收稿日期:2017-06-12

作者简介:艾波(1984-),男,工程师,研究方向为化工过程传质与分离以及精馏技术研究,15801871401@163.com;许保云(1979-),女,博士,高级工程师,研究方向为化工过程传质与分离、香料香精技术,通讯联系人,13681760977@163.com。

1.2 模型初始参数确定

在进行模型验证过程中,主要确定模型可调整的参数,比如理论板数、冷凝器持液量和每块理论板的持液量,通过调整这几个参数,使模型与实验过程相符合。

模型的验证实验在压降精馏塔内进行,实验装置如图1所示。该装置主要包括以下几个部分:①精馏塔塔体;②蒸馏釜;③冷凝器。塔体采用内径为25 mm,有效填料高度为1.5 m的整根夹套式玻璃精馏塔,内装金属矩形螺旋圈不锈钢散堆填料,塔釜为1 L的三颈圆底烧瓶,塔釜采用导热油加热,塔身用保温带保温,塔顶装有冷凝器,用低温水冷凝塔顶蒸气;原料一次性加入塔釜内,回流比用继电器和电磁铁控制,塔顶、塔釜采出样品用气相色谱仪分析其组成。



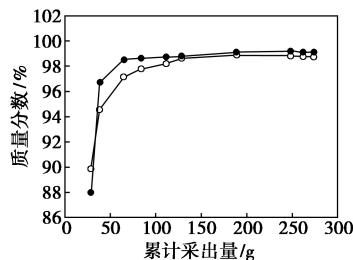
1—真空泵;2—二级缓冲罐;3—一级缓冲罐;4—塔釜;
5—散堆填料;6—玻璃塔体;7—真空管;8—冷凝器;
9—塔顶采样管;10—接液瓶;11—U型管压力计

图1 实验装置

验证实验中塔釜加入原料348.3 g,原料中桃醛质量分数为90.3%,整个分离阶段包括全回流、轻组分阶段、过渡馏分1阶段、成品阶段和过渡馏分2阶段。而模型的模拟过程条件和实验过程条件相同,包括回流比和塔顶产品的采出率,并且选用的热力学模型是NRTL,在模型模拟过程中可调参数只有模型中的理论板数、冷凝器持液量和每块理论板持液量,使模拟过程塔顶采出产品桃醛的浓度与实验过程尽可能地接近。

Aspen Plus 模拟结果与实验室小试研究结果如图2所示,图2是模型计算过程塔顶采出产品中桃醛的质量分数和实验过程塔顶采出产品桃醛质量分数的比较。在累计采出量达到38 g之前,桃醛质量分数上升很快,原因在于轻组分阶段轻组分快速被采出,桃醛不断在塔顶富集,质量分数上升很快,而在38~80 g之间是过渡馏分1阶段,由于回流比变大,使轻组分在塔顶富集,同时随着采出塔顶桃醛的

瞬时质量分数也会增大,但是变化比较缓慢,而到了成品阶段,回流比变小,此时塔顶的产品中桃醛质量分数达到合格要求,随着采出,桃醛质量分数维持在一定范围内,进入过渡馏分2阶段,回流比增大,延缓了桃醛质量分数下降的时间。从图上可以看出,实验中塔顶桃醛的瞬时质量分数变化趋势和模型模拟过程一致,相对误差在±3%以内。说明对桃醛粗品中组分简化、物性估算和模型中选择热力学方法NRTL比较合理,同时可以得到模型中调整的初始化条件的初始值,其中理论板数为34块,冷凝器持液量为0.005 5 kg,每块理论板持液量为0.000 09 kg。



质量分数:1—模型;2—实验

图2 塔顶产品中桃醛瞬时质量分数随着累计采出量的变化

2 初始化条件的优化及验证

Aspen 软件模拟精馏过程初始化条件的确定很关键,直接影响到模型计算结果,所以为了使模型模拟过程的准确,需要优化初始化条件,使模型和实验过程在操作参数相同的情况下,通过合理的试验安排方法优化初始化条件,让模拟过程最接近真实实验或生产过程,使模型计算结果可靠。

2.1 均匀试验设计

均匀试验设计是一种试验安排方法,由于考虑因素间的交互作用,对于间歇精馏初始化条件的优化有很好的适用性^[9]。

根据初始化条件的初始值结合所用精馏塔的实际情况确定各待优化参数的取值范围,具体参数范围如表1所示。

表1 参数优化范围

参数	优化范围
理论板数 X_1	32~35
冷凝器持液量 X_2	0.0045~0.0066
每块理论板持液量 X_3	0.00078~0.00099

在进行试验方案安排时选取的是 $U^*(7^4)$ 的

均匀设计表,根据 $U_{*7}(7^4)$ 的使用表,将 3 个因素安排在第 2、3、4 列,试验方案如表 2 所示。

表 2 试验方案

序号	X_1	X_2	X_3
1	34	0.00590	0.000990
2	33	0.00485	0.000955
3	32	0.00660	0.000920
4	35	0.00555	0.000885
5	34	0.00450	0.000850
6	33	0.00625	0.000815
7	32	0.00520	0.000780

将上述 7 组初始条件组合进行模型模拟计算,指标的计算公式:

$$Y = \sqrt{\sum \delta^2 / (n - 1)} \quad (1)$$

其中, δ = 在不同累计采出量下塔顶采出产品的实验质量分数 - 模型质量分数; n 为累计采出量点的个数。

根据指标公式计算的结果如表 3 所示。

表 3 计算结果

序号	X_1	X_2	X_3	Y
1	34	0.00590	0.000990	1.317556
2	33	0.00485	0.000955	1.115377
3	32	0.00660	0.000920	1.530194
4	35	0.00555	0.000885	1.160302
5	34	0.00450	0.000850	1.211626
6	33	0.00625	0.000815	1.280884
7	32	0.00520	0.000780	0.958777

2.2 初始化条件优化

初始化条件优化是将表 3 的数据通过 DPS 软件进行二次多项式拟合数学模型,通过数学模型得到预报的初始化条件组合和最小的指标 Y 值。

数学模型:

$$Y = 8.0634 - 3.0486781X_2 + 258.12287X_2 * X_2 + 7.63164X_1 * X_2 + 121.194456X_2 * X_3$$

其中该数学模型预报的初始化条件组合和最小的指标 Y 值如表 4 所示。

表 4 数学模型预报值

Y	X_1	X_2	X_3
1.0674	34.9251	0.0052	0.0008

通过数学模型可以看出,3 个初始化参数对指标都有影响,并且该数学模型预报的初始化条件值

是理论板数 35 块,冷凝器持液量是 0.005 2 kg,每块理论板持液量是 0.000 8 kg。将预报的初始化条件组合进行 Aspen 模型验证计算,能够得到 $Y_{\text{aspen}} = 1.0628$,相对误差为 0.431%,在合理范围之内。说明数学模型预报功能很好,找到了最接近实验装置在桃醛粗品分离体系操作过程中的初始参数理论板数、冷凝器持液量和每块理论板数持液量。虽然经过数学模型预报的 Y 值比表 3 中第 7 组的 Y 偏大,但是根据填料类型、填料高度和操作条件,数学模型预报的初始化条件组合更接近实际情况。

3 结论

提出了采用均匀设计优化 Aspen 模拟间歇精馏过程初始条件的方法,并以桃醛粗品原料小试实验高真空间歇精馏提纯桃醛为研究案例,探索该方法对模拟间歇精馏过程初始条件优化的效果。结果表明,经过优化后可以得到小试实验的理论板数为 35 块,冷凝器持液量为 0.005 2 kg,每块理论板持液量是 0.000 8 kg,能够使 Aspen 模型模拟间歇精馏过程更加准确,减少模拟计算的误差。该方法应用于工业间歇精馏塔操作参数时,能够得到优化的初始条件值,更加接近真实工业塔的操作情况,进而使工业精馏塔操作参数优化更加合理。

参考文献

- [1] And J C Z, Coronado C. Optimal control problem in batch distillation using thermodynamic efficiency [J]. Ind Eng Chem Res, 2008, 47 (8): 2788-2793.
- [2] Arellano-Garcia H, Carmona I, Wozny G. A new operation mode for reactive batch distillation in middle-vessel columns: Start-up and operation [J]. Computers & Chemical Engineering, 2008, 32 (1/2): 161-169.
- [3] Peng B, Shuang S. A dynamic modeling for cyclic total reflux batch distillation [J]. Chinese Journal of Chemical Engineering, 2010, 18 (4): 554-561.
- [4] Babu G U B, Aditya R, Jana A K. Economic feasibility of a novel energy efficient middle vessel batch distillation to reduce energy use [J]. Energy, 2012, 45 (45): 626-633.
- [5] 孙兰义. 化工流程模拟实训 [M]. 北京: 化学工业出版社, 2012.
- [6] 王传昌, 许保云, 艾波, 等. 基于 UD-Aspen 的间歇精馏过程优化设计研究 [J]. 现代化工, 2016, 36 (9): 175-177.
- [7] 王传昌, 许保云, 艾波, 等. 间歇精馏过程的多目标综合优化研究 [J]. 现代化工, 2017, 37 (5): 193-196.
- [8] Kim Y H. Optimal design and operation of a multi-product batch distillation column using dynamic model [J]. Chemical Engineering & Processing, 1999, 38 (1): 61-72.
- [9] 方开泰. 正交与均匀试验设计 [M]. 北京: 科学出版社, 2001, ■