

完全热集成变压精馏分离 环己烷-正丙醇的模拟

马春蕾*, 王琦, 王曼, 唐建可

(太原工业学院化学与化工系, 山西太原 030008)

摘要: 基于环己烷和正丙醇二元共沸特性的分析, 采用变压精馏对环己烷和正丙醇进行分离。为了实现变压精馏工艺的节能, 提出完全热集成变压精馏工艺。利用化工流程模拟软件, 以 NRTL 模型为物性计算方法对分离过程进行模拟。结果表明, 变压精馏和完全热集成变压精馏均能实现环己烷和正丙醇的有效分离, 两者质量分数均高于 99.5%。与变压精馏工艺相比, 采用完全热集成变压精馏工艺, 再沸器热负荷可节能 32.94%, 冷凝器热负荷节能达 35.70%。

关键词: 环己烷; 正丙醇; 完全热集成; 变压精馏; 节能

中图分类号: TQ028

文献标志码: A

文章编号: 0253-4320(2018)12-0222-04

DOI: 10.16606/j.cnki.issn 0253-4320.2018.12.051

Simulation of separation between cyclohexane and *n*-propanol by fully heat-integrated pressure swing distillation

MA Chun-lei*, WANG Qi, WANG Man, TANG Jian-ke

(Department of Chemistry and Chemical Engineering, Taiyuan Institute of Technology, Taiyuan 030008, China)

Abstract: Pressure swing distillation is used for the separation of cyclohexane and *n*-propanol azeotrope based on the analysis of their azeotropic characteristics. To realize energy conversation in pressure swing distillation process, a fully heat-integrated pressure swing distillation is proposed. This separation process is simulated by means of chemical process simulation software using NRTL model as the physical property calculation method. The results illustrate that the separation of cyclohexane and *n*-propanol can be achieved effectively by both the pressure swing distillation and the fully heat-integrated pressure swing distillation. The mass fractions of cyclohexane and *n*-propanol obtained by both two processes are higher than 99.5%. The fully heat-integrated pressure swing distillation can save energy by 32.94% in reboiler and 35.70% in condenser compared with the pressure swing distillation.

Key words: cyclohexane; *n*-propanol; fully heat-integrated; pressure swing distillation; energy saving

环己烷是一种有类似汽油气味的无色液体, 用作橡胶、涂料、清漆用溶剂和油脂萃取溶剂等, 也用作制造环己醇和环己酮的原料^[1]。正丙醇是一种具有芳香气味的无色液体, 可用于植物油类、天然橡胶和树脂类、某些合成树脂等的溶剂, 还用于杀菌剂、杀虫剂、防冻液等方面^[1]。环己烷和正丙醇是有机合成中重要的原料以及化工、制药领域重要的溶剂, 它们在常压下会形成最低二元共沸物, 共沸温度为 74.3℃, 共沸组成为环己烷质量分数 80%^[1], 采用普通的精馏方法无法实现二者的分离。

二元共沸物分离常用的精馏方法有萃取精馏^[2-6]、共沸精馏^[7-10]、变压精馏^[11-14]等。袁慎峰等^[15]报道了以二甲基亚砷和 *N*-甲基吡咯烷酮的混合物为萃取剂分离环己烷和正丙醇混合物的方法, 可得到质量分数高于 99.0% 的环己烷和正丙醇产品。孙畅等^[16]采用 DMF 作萃取剂, 利用间歇萃取精馏方法分离环己烷-正丙醇二元共沸物, 得到质量分数 96.2% 的环己烷产品。上述萃取精馏分离

的方法会引入第三组分, 使产品中夹带第三组分。变压精馏是分离二元共沸物的一种有效方法, 当压力改变使共沸组成变化超过 5% 时即可考虑采用变压精馏进行共沸物分离。在变压精馏过程中, 操作压力的改变会使得 2 个精馏塔之间具有较大的温差, 可通过将高压塔塔顶物流作为低压塔塔釜再沸器的热源进行热量集成, 达到节能降耗目的。

本研究采用变压精馏法建立高压-常压分离环己烷-正丙醇共沸物工艺流程, 利用模拟软件 Aspen Plus 进行计算, 在保证环己烷和正丙醇产品纯度条件下得到两塔理论板数、回流比和进料位置参数。利用完全热集成变压精馏工艺进行节能, 为环己烷-正丙醇二元共沸物的分离及节能提供参数依据。

1 分离原理

1.1 分离要求

环己烷-正丙醇进料为共沸组成进料, 环己烷

收稿日期: 2018-05-06; 修回日期: 2018-10-15

作者简介: 马春蕾(1988-), 女, 硕士, 讲师, 研究方向为化工、制药分离模拟, 通讯联系人, 0351-3569476, machunlei2014@163.com。

质量分数 80%, 进料量 5 000 kg/h, 进料温度 25℃。要求分离后两者质量分数均高于 99.5%。

1.2 物性计算方法

物性方法的选择是决定流程模拟结果精度的关键,合适的物性方法的选择十分重要。NRTL 模型可用于互溶及部分互溶体系的计算,其模型可以描述强非理想溶液的液-液平衡^[13],是一种常用的物性计算方法。采用 Aspen Plus 软件内置 NRTL 方程计算环己烷-正丙醇在 101.3 kPa 下的共沸组成,其中环己烷和正丙醇质量分数分别为 81.34% 和 18.66%,共沸温度为 74.65℃,与文献[1]报道的共沸组成和共沸温度非常接近。因此流程模拟中选取 NRTL 物性方程。其二元相互作用参数由 Aspen Plus 软件自行提供。

1.3 变压精馏的可行性分析及操作压力选择

模拟压力在 101.3~911.7 kPa 范围内变化对环己烷-正丙醇共沸组成和共沸温度的影响,结果见表 1。由表 1 看出,当压力增大时环己烷质量分数降低,正丙醇质量分数升高,故高压有利于分离环己烷,低压有利于正丙醇分离。在 101.3 kPa 下共沸组成环己烷质量分数 81.34%,在 607.8 kPa 下共沸组成中环己烷质量分数 75.10%,共沸组成变化为 6.24%,共沸组成变化超过 5%可以采用变压精馏进行分离。再继续增大压力时共沸组成中环己烷质量分数继续降低,但下降幅度很小,为了降低设备投资和从安全角度考虑应该选择较低的操作压力,所以选取高压塔 607.8 kPa 和常压塔 101.3 kPa 进行环己烷-正丙醇共沸物的分离研究。

表 1 不同压力下环己烷-正丙醇的共沸组成和共沸温度

压力/kPa	环己烷质量分数/%	正丙醇质量分数/%	共沸温度/℃
101.3	81.34	18.66	74.65
202.6	78.91	21.09	96.89
303.9	77.54	22.46	111.68
405.2	76.56	23.44	123.14
506.5	75.77	24.23	132.65
607.8	75.10	24.90	140.88
709.1	74.50	25.50	148.17
810.4	73.95	26.05	154.76
911.7	73.44	26.56	160.80

图 1 给出了环己烷-正丙醇物系在 101.3 kPa 和 607.8 kPa 压力下的 T_{xy} 曲线图。由图 1 可以看出,2 个压力条件下环己烷-正丙醇物系的共沸组成有明显的变化,且温差也很大,因此可考虑采用热集

成的方法降低分离系统的能耗。

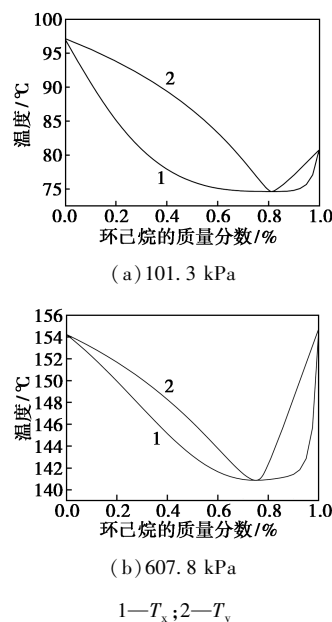


图 1 环己烷-正丙醇物系在不同压力下的 T_{xy}

2 变压精馏流程模拟

2.1 工艺流程的建立

针对给定的环己烷-正丙醇共沸物,由表 1 分析可建立高压-常压变压精馏工艺流程。具体变压精馏流程见图 2,包括 B1 高压塔和 B2 常压塔,高压塔操作压力为 607.8 kPa,常压塔操作压力为 101.3 kPa。原料 F 先进入塔 B1,塔顶物流 2 为高压条件下的环己烷-正丙醇共沸物作为常压塔 B2 的进料,塔釜物流 3 为环己烷产品,常压塔 B2 塔釜物流 4 得到正丙醇产品,塔顶物流 5 为常压条件下的共沸物,该共沸物经泵增压后与原料 F 混合返回 B1 继续精馏,实现共沸物的分离。

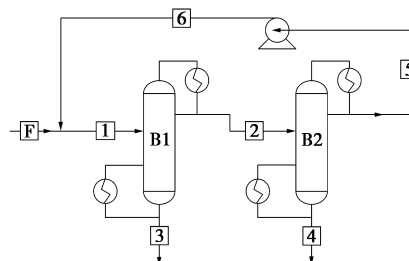


图 2 变压精馏工艺流程

2.2 模拟结果

利用 Aspen Plus 对变压精馏过程进行模拟,通过灵敏度分析工具对两塔理论板数、回流比和进料位置参数进行优化。优化后的物流计算结果如表 2 所示。

表 2 物流模拟计算结果

物流名称	温度/ ℃	流率/ (kg·h ⁻¹)	环己烷 质量分数/%	正丙醇 质量分数/%
F	25	5000	80	20
1	60.9	16970.70	80.94	19.06
2	140.9	12958.25	75.16	24.84
3	152.5	4012.45	99.63	0.37
4	97.0	987.55	0.26	99.74
5	74.7	11970.70	81.34	18.66

由表 2 可知,环己烷-正丙醇共沸物经高压-常压变压精馏分离后质量分数分别为 99.63%、99.74%,实现了二者的有效分离,满足了分离要求。优化后的变压精馏流程工艺参数见表 3。

表 3 优化后工艺参数

参数	B1	B2
理论板数	10	11
回流比	0.8	0.7
进料位置	6	6
操作压力/kPa	607.8	101.3
塔顶采出量/塔进料量	0.780	0.903
塔顶温度/℃	140.9	74.7
塔釜温度/℃	152.5	97.0

3 完全热集成变压精馏

3.1 完全热集成变压精馏流程

B1 塔顶温度为 140.9℃, B2 塔釜温度为 97.0℃, 温差为 43.9℃, 即高压塔 B1 塔顶冷凝器的温度高于常压塔 B2 塔釜再沸器的温度, 具有足够的传热推动力, 可利用 B1 塔顶的热蒸汽进入 B2 塔釜的换热器为 B2 塔釜提供能量, 从而实现有效节能。完全热集成变压精馏工艺流程如图 3 所示。根据高压塔 B1 的优化结果调整常压塔 B2 的回流比, 使高压塔冷凝器释放的热量等于常压塔再沸器需要的热量, 实现热量集成。

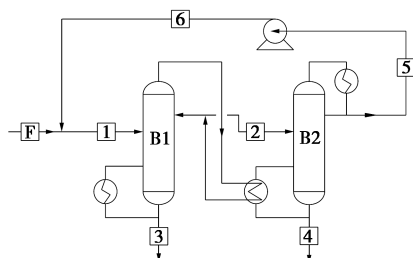


图 3 完全热集成变压精馏工艺流程

3.2 模拟结果

利用 Aspen Plus 模拟软件对完全热集成变压精馏过程进行模拟, 物流计算结果如表 4 所示。

表 4 物流模拟计算结果

物流名称	温度/ ℃	流率/ (kg·h ⁻¹)	环己烷 质量分数/%	正丙醇 质量分数/%
F	25	5000	80	20
1	60.9	16970.70	80.94	19.06
2	140.9	12958.25	75.16	24.84
3	152.5	4012.45	99.63	0.37
4	97.0	987.55	0.26	99.74
5	74.7	11970.70	81.34	18.66

由表 4 可以看出, 由 B1 塔釜物流 3 得到的环己烷质量分数为 99.63%, B2 塔釜物流 4 得到的正丙醇质量分数为 99.74%。完全热集成变压精馏流程两塔工艺参数见表 5。

表 5 完全热集成变压精馏流程工艺参数

参数	B1	B2
理论板数	10	11
回流比	0.8	1.1477
进料位置	6	6
操作压力/kPa	607.8	101.3
塔顶采出量/塔进料量	0.780	0.903
塔顶温度/℃	140.9	74.7
塔釜温度/℃	152.5	97.0

变压精馏与完全热集成变压精馏过程热负荷参数见表 6。可知与变压精馏工艺相比, 采用热集成变压精馏工艺, 再沸器热负荷可节能 32.94%, 冷凝器热负荷节能达 35.70%, 实现了有效节能。

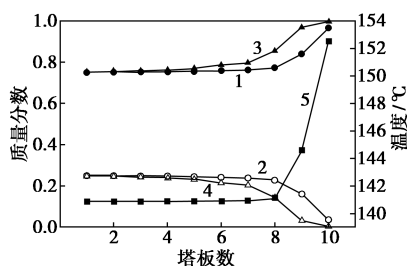
表 6 变压精馏与完全热集成变压精馏热负荷参数 kW

	变压精馏	完全热集成变压精馏
再沸器热负荷	5029.12	3372.47
冷凝器热负荷	4640.71	2984.16

3.3 B1 塔内气液相组成及温度分布

图 4 为完全热集成变压精馏工艺下的 B1 塔内气液相组成及温度分布。由图 4 可以看出, 在 B1 高压塔内, 从塔顶到塔底重组分环己烷无论是气相还是液相含量均逐步升高, 轻组分正丙醇含量则逐渐降低, 塔底环己烷质量分数接近于 1。同时由曲线趋势可以看出, 由塔釜到塔顶环己烷和正丙醇气液

相组成差异越来越接近,至塔顶则基本重合,塔顶组成为近似高压下的二者共沸组成,说明环己烷和正丙醇形成共沸。由气液相组成与温度分布说明 B1 塔已实现了 607.8 kPa 下环己烷-正丙醇共沸物与环己烷的有效分离。

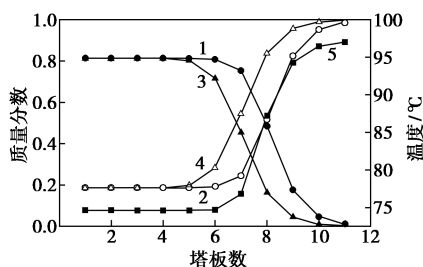


1—气相环己烷;2—气相正丙醇;3—液相环己烷;
4—液相正丙醇;5—温度

图4 B1塔内气液相组成及温度分布

3.4 B2塔内气液相组成及温度分布

图5为完全热集成变压精馏工艺下的B2塔内气液相组成及温度分布。由图5可以看出,在B2常压塔内,从塔顶到塔底环己烷的气液相含量均逐步降低,正丙醇含量逐渐升高,塔底正丙醇质量分数接近于1。由塔釜到塔顶环己烷和正丙醇气液相组成差异越来越接近,至塔顶则基本重合,环己烷与正丙醇形成常压下共沸物。由气液相组成与温度分布说明B2塔已实现了常压下环己烷-正丙醇共沸物与正丙醇有效分离。



1—气相环己烷;2—气相正丙醇;3—液相环己烷;
4—液相正丙醇;5—温度

图5 B2塔内气液相组成及温度分布

4 结论

(1) 基于环己烷和正丙醇二元共沸特性的分析,建立高压-常压变压精馏分离环己烷和正丙醇共沸物工艺流程。

(2) 利用 Aspen Plus 模拟软件,对环己烷-正丙醇变压精馏流程进行模拟,高压塔操作压力 607.8 kPa,常压塔操作压力 101.3 kPa。优化结果为:B1

理论板数 10 块,B2 理论板数 11 块;原料在高压塔 B1 第 6 块板进料,常压塔 B2 为第 6 块板进料;B1 回流比 0.8,B2 回流比 0.7;B1 塔顶采出与进料摩尔比 0.780,B2 塔顶采出与进料摩尔比 0.903。可得质量分数 99.63% 的环己烷产品和质量分数 99.74% 的正丙醇产品。

(3) 调节 B2 回流比为 1.147 7,可实现两塔冷凝器-再沸器完全热集成,与变压精馏工艺相比,采用完全热集成变压精馏工艺,再沸器热负荷可节能 32.94%,冷凝器热负荷节能达 35.70%。实现了有效节能。

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.
- [2] 刘建新,肖翔.萃取精馏技术与工业应用进展[J].现代化工,2004,24(6):14-17.
- [3] 张浩,徐红,戴昕,等.萃取精馏分离三甲氧基硅烷和甲醇的模拟和优化[J].现代化工,2015,35(1):163-165.
- [4] 康伟,孙平涛,梁朋,等.环己烷-乙酸乙酯萃取精馏分离的研究[J].化工进展,2017,36(S1):73-79.
- [5] 李嘉琪.异丙醇和乙酸异丙酯萃取精馏分离的研究[D].天津:天津大学,2016.
- [6] 马春蕾,唐建可.萃取精馏分离四氢呋喃-水共沸物的模拟研究[J].现代化工,2016,36(9):182-185.
- [7] 杨颖,范开功,白鹏,等.共沸精馏分离2-甲基吡啶和水[J].化工进展,2017,36(9):3243-3249.
- [8] 康霖.共沸精馏分离乙醇-水体系的分析及模拟研究[D].西安:西北大学,2013.
- [9] 白鹏,朱良伟,李晓峰,等.正己烷和乙酸乙酯间歇共沸精馏分离共沸剂的研究[J].石油化工,2006,35(1):37-41.
- [10] 孙加伟,许松林.采用变压精馏回收共沸剂的正丙醇-水共沸精馏模拟研究[J].计算机与应用化学,2014,31(8):972-976.
- [11] Li Wei-song, Shi Lei, Yu Bao-ru, et al. New pressure-swing distillation for separating pressure-insensitive maximum boiling azeotrope via introducing a heavy entrainer: Design and control[J]. Ind Eng Chem Res, 2013, 52(23): 7836-7853.
- [12] 孔鹏,高瑞昶.变压精馏分离甲醇-丙酮的工艺模拟及优化[J].化工进展,2013,32(11):2583-2587.
- [13] 刘乔,高瑞昶.完全热集成变压精馏分离乙酸乙酯和甲醇的模拟[J].现代化工,2016,36(11):188-192.
- [14] 杨靖,李璐,张迪.变压精馏分离甲醇与乙腈过程模拟与分析[J].过程工程学报,2016,16(6):941-945.
- [15] 袁慎峰,尹红,高孜孜,等.一种用萃取精馏分离环己烷和正丙醇混合物的方法:CN,104774132A[P].2015-07-15.
- [16] 孙畅,白鹏,梁金华,等.间歇萃取精馏分离环己烷-正丙醇的研究[J].现代化工,2013,33(6):108-111. ■