

甲醇羰基化制乙酸生产过程的模拟与优化分析

黄良德^{1,2}, 韦孟宇^{1,2}, 童张法^{1,2}, 金 庸³, 蒋迎花^{1,2*}

(1.广西石化资源加工及过程强化技术重点实验室, 广西大学化学化工学院, 广西 南宁 530004;
2.绿色化工新材料广西高校工程研究中心, 广西大学化学化工学院, 广西 南宁 530004;
3.广西华谊能源化工有限公司, 广西 钦州 535000)

摘要:为了降低工业上甲醇羰基化生产乙酸过程中的能耗, 构建了甲醇羰基化生产乙酸过程的模拟模型, 并采用“局部-整体”的优化路线对乙酸生产过程进行工艺改造, 最后对工艺进行能耗和费用的评估。局部改造采用热泵辅助精馏技术降低分离塔的能耗, 而整体改造则采用夹点技术对整个乙酸生产过程进行换热网络改造。结果表明, 所构建的甲醇羰基化制乙酸生产流程能够生产出符合要求的产品; 其次, 在结合热泵精馏技术之后虽然投资费用增加了 23.31%, 但是公用工程费用和总费用分别下降了 13.76% 和 7.60%; 最后, 在热泵技术的基础上结合换热网络, 投资费用增加 12.47%, 但是公用工程费用和总费用分别下降了 44.76% 和 31.57%。这表明所提出的方案是通过提高投资费用从而降低公用工程费用, 进而达到降低总费用的目的, 为乙酸生产过程的优化提供了有效方案。

关键词: 甲醇羰基化制乙酸; 热泵精馏; 换热网络; 经济性分析

中图分类号: TQ028.3

文献标志码: A

文章编号: 0253-4320(2026)10-0225-07

DOI: 10.16606/j.cnki.issn0253-4320.2026.10.037

Simulation and optimization analysis of methanol carbonylation to acetic acid production process

HUANG Liang-de^{1,2}, WEI Meng-yu^{1,2}, TONG Zhang-fa^{1,2}, JIN Yong³, JIANG Ying-hua^{1,2*}

(1. Guangxi Key Laboratory of Petrochemical Resource Processing and Process Intensification Technology, School of Chemistry and Chemical Engineering, Guangxi University, Nanning 530004, China; 2. University Engineering Research Center of Green Chemical New Materials, School of Chemistry and Chemical Engineering, Guangxi University, Nanning 530004, China; 3. Guangxi Huayi Energy Chemical Co., Ltd., Qinzhou 535000, China)

Abstract: In order to reduce the energy consumption in the industrial process of acetic acid production via methanol carbonylation, a simulation model of methanol carbonylation to acetic acid was constructed, and the process of acetic acid production was modified using a “local overall” optimization route. Finally, the energy consumption and cost of the process were evaluated. The heat pump-assisted distillation technology was used to reduce the energy consumption of the separation tower in the local transformation, while the pinch technology was used to transform the heat exchange network of the whole acetic acid production process in the overall transformation. The results showed that the process of methanol carbonylation to acetic acid could produce qualified products; Secondly, although the investment cost increased by 23.31% after the combination of heat pump distillation technology, the utility cost and total cost decreased by 13.76% and 7.60% respectively; Finally, based on the heat pump technology and combined with the heat exchange network, the investment cost increased by 12.47%, but the utility cost and total cost decreased by 44.76% and 31.57% respectively. This shows that the proposed scheme is to reduce the cost of utility by increasing the investment cost, so as to reduce the total cost, which provides an effective scheme for the optimization of acetic acid production process.

Key words: carbonylation of methanol to acetic acid; heat pump distillation; heat exchanger network; economic analysis

乙酸是一种重要的化学物质, 广泛应用于制药、食品等多个领域^[1]。工业上合成乙酸的方法主要包括甲醇羰基化法^[2]、乙醛氧化法^[3]、乙烯直接氧化法^[4]和乙烷直接氧化法^[5]等。其中, 甲醇羰基化法因高效和经济性而成为目前工业上应用最广泛的乙酸生产工艺, 约占世界乙酸制造能力的 75%^[6]。

甲醇羰基化法制备乙酸过程中的反应和分离工段均属于能量密集过程, 能源消耗较高。为了减低乙酸生产过程的能源消耗和提高系统的能源利用效率, 有必要采用相关节能技术对其进行改造优化。

从生产流程中不同作用的工段来看, 产品分离提纯工艺的能耗往往占比很高, 同样的甲醇羰基化

收稿日期: 2025-11-26; 修回日期: 2026-08-03

基金项目: 广西科技重大专项项目(桂科 AA23062019-4); 广西青年科技人才工程项目(GXYESS2025048); 广西大学高层次人才引进科研项目(A3040051027)

作者简介: 黄良德(2001-), 男, 硕士, 研究方向为过程系统工程; 蒋迎花(1992-), 女, 博士, 讲师, 研究方向为过程系统工程, 通讯联系人, jiangyinghua@gxu.edu.cn。

脱水塔进行脱水处理。在脱水塔中,水从塔顶排出,并通过冷凝器冷凝后,收集到乙酸-水分离塔的顶端储槽中,从脱水塔底部流出的乙酸通过出料泵输送至精制塔。在精制塔中,去除残留的丙酸等杂质,这些杂质会从塔底排出,而高浓度的乙酸则通过产品冷却器降温后,进入产品乙酸中间槽。

1.2 优化策略

为了降低乙酸生产过程的能耗和提高能源的利用效率,本文中采用“局部-整体”的优化路线对乙酸生产过程进行工艺改造。其中,局部改造采用热泵辅助精馏技术降低分离塔的能耗,而整体改造则采用夹点技术对整个乙酸生产过程进行换热网络改造。最后,对乙酸生产过程进行能耗和费用的评估,对比改造前后的能耗和经济性。

1.2.1 热泵辅助精馏

热泵精馏可以辅助回收利用工艺中局部中的某些流股的能量,这一工艺是将塔顶物料经过压缩机的绝热压缩后提高其温度,随后作为热源通过换热器蒸发塔釜液体,并且为了避免压缩比过大要求塔顶和塔底的温差一般不超过 30°C [17]。塔釜液体经过闪蒸处理后进行气液分离,其中一部分作为塔底产物,另一部分则回流至塔底。另一方面,压缩气体在换热的过程中冷凝成液体,冷凝液通过节流阀进行减压,并通过分离器进行分流,一部分冷凝液作为塔顶馏出物,而用于回流的另一部分则返回至塔顶。脱水塔的常规精馏工艺改造过程如图 2 所示。

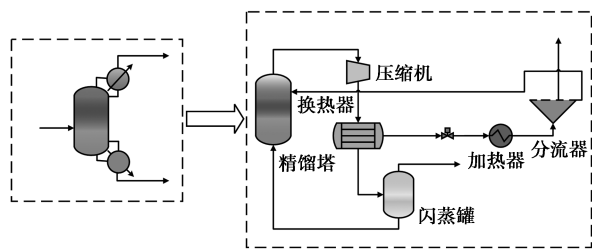


图 2 热泵辅助精馏技术改造

1.2.2 夹点技术

夹点技术是高效的换热网络优化手段,依托热集成提升系统能量利用率;先借助温焓图分温区开展热平衡计算,定位夹点、核算最小公用工程用量;再针对性优化换热网络设计,最大化余热回收,削减公用工程消耗与成本,兼顾节能与改造经济性。

1.3 经济性分析方法

本文中选用年总费用 TAC 作为经济评估指数, TAC 的计算如式(1)所示。

$$TAC = TCC/\mu + TOC \quad (1)$$

式中, TCC 为投资费用; TOC 为操作费用; μ 为投资回报周期;投资费用 TCC 如式(2)所示。

$$TCC = C^{\text{Re}} + C^{\text{Fc}} + C^{\text{HeX}} + C^{\text{Com}} \quad (2)$$

式中, C^{Re} 为反应器成本; C^{Fc} 为精馏塔成本; C^{HeX} 为换热器成本; C^{Com} 为压缩机成本。反应器的成本如式(3)所示。

$$C^{\text{Re}} = 80\,500 \times V^{0.45} \quad (3)$$

式中, V 为反应器体积。精馏塔的成本如式(4)所示。

$$C^{\text{Fc}} = C^{\text{Vessel}} + C^{\text{Stage}} + C^{\text{Con}} + C^{\text{Reb}} \quad (4)$$

式中, C^{Vessel} 为塔身成本; C^{Stage} 为塔板成本; C^{Con} 为冷凝器成本; C^{Reb} 为再沸器成本。塔身成本如式(6)所示。

$$C^{\text{Vessel}} = 7 \times (\text{M\&S}/280) \times 937.636 \times D^{1.066} \times H^{0.802} \times (2.18 + F_c) \quad (5)$$

$$H = 0.61 \times (N_T - 2) \times 1.2 \quad (6)$$

式中, D 为塔内径; H 为塔高; N_T 为理论塔板数; F_c 、 F_m 均为经济衡算中的系数; F_p 为压力校正系数;M&S 为 Marshall & Swift 系数。

塔板成本计算如式(7)所示。

$$C^{\text{Stage}} = 7 \times (\text{M\&S}/280) \times 97.243 \times D^{1.066} \times H \times F_c \quad (7)$$

$$F_c = F_f + F_a + F_m \quad (8)$$

换热器成本计算如式(9)~(11)所示。

$$C^{\text{HeX}} = 7 \times (\text{M\&S}/280) \times 474.668 \times A^{0.65} (2.29 + F_c) \quad (9)$$

$$F_c = (F_d + F_p) F_m \quad (10)$$

$$A = Q/(\Delta t \times \kappa) \quad (11)$$

式中, Q 为热负荷; A 为换热面积; κ 为热交换因子; Δt 为对数平均温差。

压缩机成本计算如式(12)所示。

$$C^{\text{Com}} = 7 \times (\text{M\&S}/280) \times 2\,074.24 \times bp^{0.82} \quad (12)$$

式中, bp 为压缩机功率。

操作费用 TOC 计算如式(13)所示。

$$TOC = 7\,200 C^{\text{NRG}} \quad (13)$$

能耗费用计算如式(14)所示。

$$C^{\text{NRG}} = \sum_i F_i \cdot P_i \quad (14)$$

式中, C^{NRG} 为能耗费用; F_i 为 i 种公用工程的用量; P_i 为 i 类公用工程的价格。

2 案例分析

2.1 基础数据

数据来源于广西某乙酸生产工厂,反应物甲醇由甲醇加料泵输送至反应器内,一氧化碳经多级压缩后通过反应器内的一氧化碳分布器直接喷入反应器,反应器的停留时间为 40 min,甲醇的转化率为 99%,选择性为 86%,产率为 84%。经过模拟和灵敏

度优化之后所得乙酸生产模拟流程中反应和分离工段的流程模拟参数如表 1 所示。根据本文中所构建的甲醇羰基化乙酸生产过程模拟模型和生产条件,

可以获得乙酸生产过程的物料流股平衡图,如图 3 所示。从图 3 可见,所生产的产品符合工业冰乙酸 I 型的技术要求。

表 1 反应工段和分离工段流程模型设置

反应工段			分离工段		
单元	模型	关键参数	单元	模型	关键参数
主反应反应器	RCSTR	$P=3\text{ MPa}, T=195^{\circ}\text{C}$	脱轻塔	RadFrac	$RR=4.6, FS=19, NS=30$
副反应反应器	RSTOIC	$P=3\text{ MPa}, T=195^{\circ}\text{C}$	脱水塔	RadFrac	$RR=6, FS=23, NS=36$
压缩机	MCompr	$P=3.5\text{ MPa}$	精制塔	RadFrac	$RR=6, FS=16, NS=33$
热交换器 H-1	Heater	$T=100^{\circ}\text{C}$	精馏塔	RadFrac	$RR=6.5, FS=20, NS=35$
冷交换器 H-2	Heater	$T=30^{\circ}\text{C}$	冷换热器 H-4	Heater	$T=25^{\circ}\text{C}$
冷交换器 H-3	Heater	$T=5^{\circ}\text{C}$	冷换热器 H-5	Heater	$T=10^{\circ}\text{C}$
闪蒸罐-1	Flash	$P=0.1\text{ MPa}, T=15^{\circ}\text{C}$	冷换热器 H-6	Heater	$T=25^{\circ}\text{C}$
闪蒸罐-2	Flash	$P=0.1\text{ MPa}, T=35^{\circ}\text{C}$	热换热器 H-7	Heater	$T=35^{\circ}\text{C}$
			闪蒸罐-3	Flash	$P=0.2\text{ MPa}, T=10^{\circ}\text{C}$

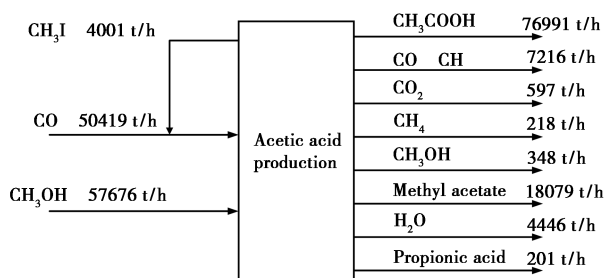


图 3 乙酸生产过程的物料平衡图

2.2 热泵优化

在乙酸生产流程的分离工段中,根据热泵精馏的安装条件和乙酸生产流程的具体情况,可以得知脱水塔比较适合热泵集成。脱水塔的塔顶、塔底温度分别为 100°C 、 117°C ,采用热泵集成后的乙酸生产流程如图 4 所示。在图 4 中,脱水塔的水蒸气压力为 0.1 MPa ,经过压缩机加压后提高至 0.19 MPa ,水蒸气温度上升至 178°C 后作为热源为塔底物料提

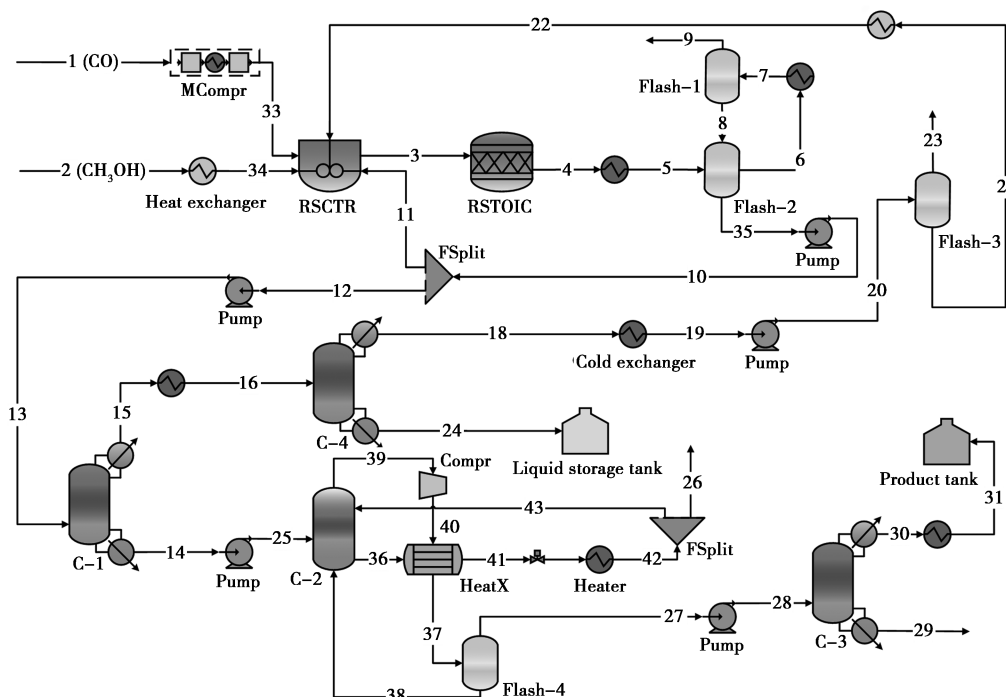


图 4 集成热泵技术后的乙酸生产流程

供热能,换热之后的蒸气经过降压冷凝后部分排出,塔底的乙酸产品部分回到脱水塔,另一部分则进入下一工艺继续提纯。

脱水塔经热泵精馏改造前后,通过 1.33 MW 的压缩机能耗节省了 18.6、18.71 MW 的冷凝器能耗和再沸器能耗,使得流程节省了 93.14% 的脱水塔总能耗,所以热泵精馏可以有效地节省脱水塔的能源消耗。

2.3 换热网络优化

乙酸生产过程的总费用系数随着换热温差的变化情况如图 5 所示。由图 5 可知,随着 $\Delta T_{\min}$ 上升总费用系数先下降后上升,并且在 7~8℃ 区间内上升得最快。这是因为精制塔塔顶的冷凝器可以提供大量的能量,但是温度不高,并且由于属于相变过程导致温度变化很小。在本文中选择 $\Delta T_{\min}$ 为 6℃。当然, $\Delta T_{\min}$ 也可以由设计师或决策者或实际需求来确定。在 $\Delta T_{\min}$ 等于 6℃ 时,乙酸生产过程的总组合曲线如图 6 所示。如图 6 可见,夹点温度为 136℃,此时的理论最小冷、热公用工程用量分别为 1.618×10^8 、 1.938×10^8 kJ/h。

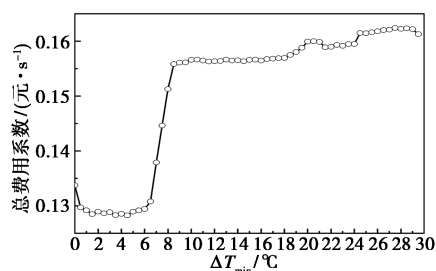


图 5 $\Delta T_{\min}$ 与总费用系数的关系

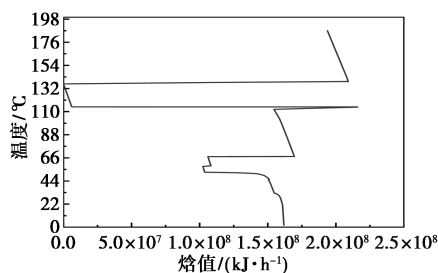


图 6 总组合曲线

乙酸生产过程的原始换热网络如图 7 所示,冷、热公用工程用量分别 3.212×10^8 、 3.533×10^8 kJ/h,远大于夹点温度下的公用工程用量。因此,需基于夹点技术对原始换热网络的设计进行重新评估与改进。

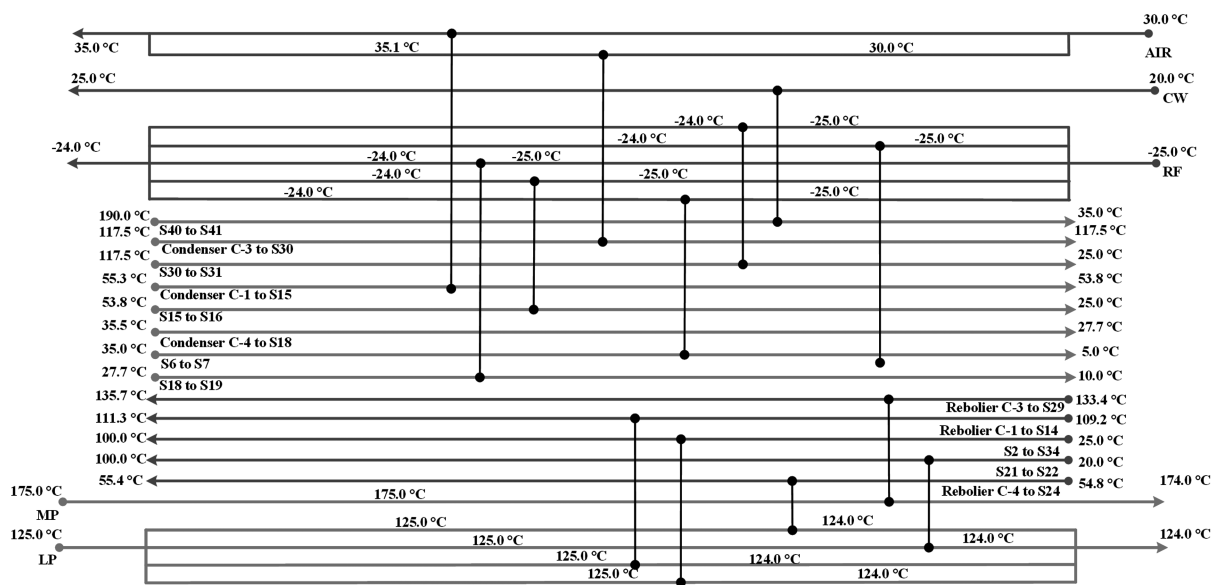


图 7 原换热网络结构

根据 $\Delta T_{\min}$ 为 6℃ 和夹点温度为 136℃ 改进后的换热网络如图 8 所示,改进后的换热网络在原始换热网络的基础上优先使用流程内部的流股作为热源,充分利用了工艺过程中流股的潜热。例如,在原有的换热网络中并没有考虑到精制塔塔顶出料和反应器产物中的余热,在优化后的换热网络中充分回收了这 2 股物料的余热,从而进一步增强

整体经济效益。

改造前后的换热网络的冷、热公用工程能耗分别为 1.621×10^8 、 1.941×10^8 kJ/h,与原始换热网络设计相比,优化后的换热网络冷、热公用工程分别降低了 45.06%、49.53%,并且总费用系数由原来的 0.227 4 降低至 0.143 0,说明优化后的换热网络不仅减轻了系统的能耗负担,还在经济性方面有显著提升。

13. 76%和 44. 76%,这也使得整个乙酸生产工艺的年总费用降低了 7. 60%和 31. 57%,这说明了这 2 种改造方法都是从降低公用工程费用的角度来降低年总费用,并且换热网络效果更好。本研究为工业上甲醇羰基化生产乙酸的流程进行流程优化提供了理论基础和技术方案,未来可以在这项研究的基础上结合废液处理技术完善整体的生产流程,或者结合可再生能源和其他的节能技术进一步降低能源的损耗。

参考文献

- [1] Tezel Özge, Beyler Çiğil Aşlı, Kahraman M V. Encapsulation of trichloroacetic acid and trifluoroacetic acid for autonomous self healing coatings[J]. *Polymer-Plastics Technology and Materials*, 2020, 59(18): 2040–2049.
- [2] Kalck P, Le Berre C, Serp P. Recent advances in the methanol carbonylation reaction into acetic acid[J]. *Coordination Chemistry Reviews*, 2020, 402: 213078.
- [3] 邱文高. 乙醛氧化制醋酸[J]. *金山油化纤*, 1987, (2): 26–28, 68.
- [4] 袁媛, 徐佩若, 朱志华. 乙烯直接氧化制乙酸的研究 II. Mo 氧化物对催化剂性能的影响[J]. *华东理工大学学报*, 2000, (2): 130–133.
- [5] Lopez-Sanchez J A, Tanner R, Collier P, *et al.* Acetic acid stability in the presence of oxygen over vanadium phosphate catalysts: Comments on the design of catalysts for the selective oxidation of ethane[J]. *Applied Catalysis A: General*, 2019, 226(1/2): 323–327.
- [6] 李凤娟. 甲醇羰基化生产醋酸技术分析[J]. *现代盐化工*, 2023, 50(1): 4–6.
- [7] Wang W X, Yang Q Y, Xu H B, *et al.* Effects of separation sequences on the reactive distillation coupled with extractive distillation under different pressures[J]. *Chemical Engineering Science*, 2024, 300: 120604.
- [8] Xu Z Y, Wang R Z, Yang C. Perspectives for low-temperature waste heat recovery[J]. *Energy*, 2019, 176: 1037–1043.
- [9] Markowski M, Trafczynski M, Kisielski P. The dynamic model of a rectification heat exchanger using the concept of heat-integrated distillation column[J]. *Energy*, 2022, 256: 124622.
- [10] Labidi J, Paris J, Le Goff P. A new concept in gas-fired heat pump reversed rectification heat pump[J]. *Renewable Energy*, 1994, 5(5/6/7/8): 1235–1239.
- [11] 刘佳男, 李宗衡, 李智, 等. 醋酸乙烯的热泵精馏工艺模拟[J]. *现代化工*, 2021, 41(1): 215–218.
- [12] Yang D M, Wan D H, Yun Y, *et al.* Energy-saving distillation process for mixed trichlorobenzene based on ORC coupled MVR heat pump technology[J]. *Energy*, 2022, 262: 125565.
- [13] 黄良德, 童张法, 金庸, 等. 低含水量乙酸废液分离过程的模拟与能耗-经济性分析[J]. *华东理工大学学报: 自然科学版*, 2025, 51(4): 468–475.
- [14] Matsuda K, Hirochi Y, Tatsumi H, *et al.* Applying heat integration total site based pinch technology to a large industrial area in Japan to further improve performance of highly efficient process plants[J]. *Energy*, 2009, 34(10): 1687–1692.
- [15] Aleksandar A. Design of common heat exchanger network for batch processes[J]. *Applied Thermal Engineering*, 2014, 65(1/2): 458–468.
- [16] Linnhoff B, Hindmarsh E. The pinch design method for heat exchanger networks[J]. *Chemical Engineering Science*, 1983, 38(5): 745–763.
- [17] 叶启亮, 赵成辉, 孙浩, 等. 乙腈法抽提丁二烯流程模拟与优化[J]. *现代化工*, 2023, 43(12): 204–208, 212. ■
- (上接第 224 页)
- [9] Jurtz N, Kraume M, Wehinger G D. Advances in fixed-bed reactor modeling using particle-resolved computational fluid dynamics (CFD)[J]. *Reviews in Chemical Engineering*, 2019, 35(2): 139–190.
- [10] Li Y, Cao H, Wang X, *et al.* A new correlation-similarity conjoint algorithm for developing encoder-decoder based deep learning multi-step prediction model of chemical process[J]. *Chemical Engineering Science*, 2024, 288: 119748.
- [11] Xu X, Kang Q, Zhang W, *et al.* An FPM-DM hybrid model for yield prediction of gas-liquid micro-sulfonation[J]. *Chemical Engineering Science*, 2025, 312: 121670.
- [12] Chang Y, Shang Q, Yan Z, *et al.* Data-driven models for microfluidics: A short review[J]. *Biomicrofluidics*, 2024, 18(6): 061503.
- [13] Chang Y, Sheng L, Wang J, *et al.* A general neural network model co-driven by mechanism and data for the reliable design of gas-liquid T-junction microdevices[J]. *Lab on a Chip*, 2023, 23(22): 4888–4900.
- [14] Qin M, Liu Y, Wang M, *et al.* Meta-learning driven low-data multi-objective optimization of microchannel gas-liquid sulfonation[J]. *Chemical Engineering Science*, 2025, 320: 122379.
- [15] Peng Y, Wang L. Heterogeneity-aware transfer learning for high-dimensional linear regression models[J]. *Computational Statistics & Data Analysis*, 2025, 206: 108129.
- [16] Wang H, Pei J, Yan F, *et al.* Application of TabPFN model on the energy performance improvement of high-power multistage centrifugal pump[J]. *Energy*, 2025, 336: 138399.
- [17] Hollmann N, Müller S, Purucker L, *et al.* Accurate predictions on small data with a tabular foundation model[J]. *Nature*, 2025, 637(8045): 319–326.
- [18] Huang W, Chen X, Lv Q, *et al.* Rapid preparation of waterborne polyurethane dispersions using continuous-flow microreaction technology[J]. *Reaction Chemistry & Engineering*, 2025, 10: 1326–1336.
- [19] Choooplou C A, Balahang S, Ghodsian M, *et al.* Predicting scour depth in the presence of aprons using XGBoost-Optuna[J]. *Applied Soft Computing*, 2025, 184: 113766. ■