

信息技术应用

水溶液全循环法尿素合成塔模拟软件的开发

刘晶¹, 闫玉莲¹, 陈理², 张述伟¹, 刘孝弟³, 赵中⁴

(1. 大连理工大学化工学院, 辽宁大连 116012; 2. 大连大学环境与化学工程学院, 辽宁大连 116622; 3. 北京航天动力研究所, 北京 100076; 4. 华陆工程科技有限责任公司, 陕西西安 710054)

摘要:以水溶液全循环工艺数据为基础,对尿素生产过程中最为关键的尿素合成塔进行了模拟研究,在模拟过程中考虑了进塔物流混合程度和塔板效率对CO₂转化率的影响。运用Visual Fortran语言开发出了尿素合成塔的主程序,运用Visual Basic语言开发出了模拟软件的界面。所开发的模拟软件具有良好的模拟精确度,能够反映出混合程度与塔板效率对CO₂转化率的影响。由Visual Basic编制的界面程序具有友善的人机交互界面,便于操作,同时具有绘图等附加功能。

关键词:尿素合成塔;模拟软件;NH₃-CO₂-H₂O-urea体系;混合编程

中图分类号:TQ441.41

文献标识码:A

文章编号:0253-4320(2011)01-0079-05

Development of simulative software for urea converter in aqueous solution total recycle process

LIU Jing¹, YAN Yu-lian¹, CHEN Li², ZHANG Shu-wei¹, LIU Xiao-di³, ZHAO Zhong⁴

(1. School of Chemical Engineering, Dalian University of Technology, Dalian 116012, China;

2. School of Environmental and Chemical Engineering, Dalian University, Dalian 116622, China;

3. Beijing Aerospace Propulsion Institute, Beijing 100076, China;

4. Hualu Engineering & Technology Co., Ltd., Xi'an 710054, China)

Abstract: Based on process data of total aqueous solution recycle method, urea converter which is the most crucial equipment in urea production process is simulated. And during the simulation, the mixing degree and plate efficiency that can affect CO₂ conversion are also considered. The main simulative software of the urea converter is programmed with Visual Fortran language and its interface is programmed by Visual Basic language. The simulative software has a good simulation accuracy and can reflect the mixing degree and plate efficiency on the CO₂ conversion. The software interface which is developed by the Visual Basic has friendly man-machine interface, easy operation, and additional features such as drawing.

Key words: urea converter; simulative software; NH₃-CO₂-H₂O-urea system; hybrid programming

目前,尿素合成工艺主要有水溶液全循环法、三井东压、东洋工程改良C法、斯卡米卡邦二氧化碳汽提法、斯纳姆普罗盖蒂氨汽提法等,其中水溶液全循环法由于投资少、起步早、国产技术最成熟等因素,采用该技术生产的尿素约占我国尿素总生产能力的50%左右,因而对水溶液全循环法尿素生产流程进行模拟研究,对于提高尿素产量和节能改造提供理论指导具有很重要的实际意义^[1-2]。

在现代工业流程的模拟计算中,计算机已经得到了广泛的应用。虽然目前已有对尿素合成塔、氨汽提塔、合成高压圈甚至是整个尿素生产流程进行了数值模拟的研究报道^[3-5],但由于尿素合成中所涉及的物系是强极性的非理想性物系,同时尿素合成塔是在高温高压的操作条件下运行的,各类因素综合起来使得对该装置的准确模拟计算比较困难。

目前国内仅有青岛科技大学的URPS尿素模拟软件可以应用于水溶液全循环法尿素流程模拟计算中^[3]。迄今为止,对该流程的模拟依旧存在很多问题难以实现商业化。现在国内尿素生产装置同时面临着装置老化和技术改造的压力,开发能够用于尿素合成装置改造的模拟软件,对水溶液全循环法尿素合成塔进行模拟优化具有非常重要的工业意义。该文以《化肥工业丛书——尿素》^[1]一书中提供的参数为设计基准对水溶液全循环法的尿素合成塔的工况,开发出了尿素合成塔的模拟软件,该软件除了具有常规水溶液全循环法模拟计算的功能外,还具有对工业生产中尿素合成塔的某些改造工况进行模拟计算的功能,从而扩大了软件的适用范围,为今后进行尿素合成塔技术改造提供技术支持。

在该软件的开发过程中采用了2种高级语言

收稿日期:2010-08-10

作者简介:刘晶(1985-),男,硕士生,0411-39893953,lij00772004@mail.dlut.edu.cn;张述伟(1963-),男,硕士,教授,副院长,从事化工过程模拟与优化以及计算机辅助过程操作研究,0411-39893979, zsw@chem.dlut.edu.cn;通讯联系人,陈理,0411-87402448, chenli5@yahoo.com.cn。

混合编程的方法。Visual Fortran(VF)和 Visual Basic(VB)间的混合编程及调用方法使得所有数据都通过硬盘文件进行交换,数据交换非常经济,效率也非常高^[6-7]。最终完成的软件具有较为理想的计算功能和良好的人机交互界面。

1 模拟软件的数学模型

水溶液全循环法尿素合成塔中可视为两相物流,其中气相物流是由 NH_3 、 CO_2 、 H_2O 以及惰性气体 N_2 、 H_2 、 O_2 等构成的混合物,液相物流是复杂的 NH_3 - H_2O - CO_2 - $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$ 构成的混合物系。模拟计算主要涉及的模型有热力学模型、反应动力学模型和塔的物理模型。

1.1 合成反应模型及基本假设

在高温高压条件下,尿素合成过程是 1 个复杂的多相反应过程。通过前人的研究,已经对该过程做了合理的假设和简化,在简化后的反应过程中只考虑了甲铵生成反应、甲铵脱水生成尿素的反应^[8]。简化后的反应过程更易于模拟,同时不会影响模拟的准确性。

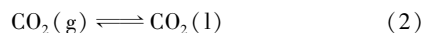
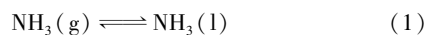
1.1.1 热力学模型

尿素合成物系所涉及的物流有气相物流和液相物流。为了计算方便,取各物流零焓值的基准态:温度,25℃;压力,0.1 MPa; NH_3 、 CO_2 、 H_2 、 N_2 、 O_2 均为气态纯物质; H_2O 为液态纯物质。气相混合物的焓选用 Nakamura 提出扰动硬球状态方程——Perlured-Hard-Sphere(PHS)状态方程计算;而液相混合物的焓则通过计算理想溶液的焓以及实际溶液与理想溶液的焓差(过剩焓)获得^[9]。气相非理想性也是选用 PHS 状态方程计算气相各组分逸度系数来描述。液相非理想性选用扩展 UNIQUAC 方程来计算各组分的活度系数。

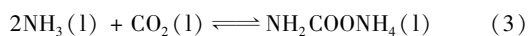
1.1.2 动力学模型

在进行尿素合成反应的过程中 NH_3 与 CO_2 必须溶解成为液态才会生成甲铵,因此甲铵生成反应分为 2 步,其中第 2 步反应瞬间完成。

第 1 步:



第 2 步:



甲铵生成反应几乎在瞬间即可达到化学平衡。当 NH_3 过量时,溶解态的 CO_2 能极快地几乎全部(97%~98%)转化为液态甲铵(反应方程式 3)^[10],

该反应为放热反应(放热量 159.36 kJ/mol)。液态甲铵脱水转化为尿素的反应也是 1 个在液相中进行的化学反应,反应速度比较慢,因此该反应是尿素合成反应的控制步骤,该反应为吸热反应(吸热量为 28.47 kJ/mol),其动力学方程式可用式(6)表示:

$$r = k_1 c_{\text{AM}} - k_2 c_{\text{U}} c_{\text{H}_2\text{O}} \quad (4)$$

在反应动力学方程式(4)中 k_1 和 k_2 分别代表甲铵脱水反应正逆反应速率系数, c_{AM} 、 c_{U} 、 $c_{\text{H}_2\text{O}}$ 分别代表甲铵、尿素、水的浓度。

1.2 合成塔模型及基本假设

为了降低模拟程序的计算量,将合成塔内部视为有多个平衡级反应器串联而成,具体假设如下:①将合成塔分成若干个小室,每个小室内气液两相混合良好,作为 1 个平衡级反应器,每 1 级都当成理想混合模型或称全混流模型求解;②在每块板的出口处气液两相都达到相平衡状态;③将整个反应过程视为绝热反应过程处理。

该模型虽然将合成塔内反应过程进行了简化,但是能够较为详细地描述合成塔内相邻两块塔板间的物流参数分布。将热力学模型单独进行求解,反应器的建模和求解类似于无反应发生过程,简化了伴有化学反应发生的气液相平衡过程的模拟计算^[11]。

2 模拟软件的设计及实现

2.1 模拟主程序的设计及实现

尿素合成塔主程序采用逐级计算的方法,即对每级小室建立组分的物料衡算方程(4 个)、总热量衡算方程(1 个)、气液相平衡方程(3 个)、反应动力学方程(1 个)、单板压降计算方程(1 个)以及归一化方程(1 个)共 11 个非线性方程。已知进口气液相的温度、压力、流量及组成共 11 个变量时,可求出出口气液相的 11 个变量。当第 n 个小室计算完毕,即可得到合成塔出口尿素转化率、温度、压力、气液相出口流股流量组成等主要模拟结果。该程序利用改进牛顿法进行求解,这种解法使得程序收敛性和解算速度得到了很大地提高。

程序模拟计算框图如图 1 所示。程序设计思路简单易行,但反复调用子程序的循环计算过程也会耗用大量机时,虽然随着计算机硬件水平的提高,完全可以弥补机时损耗大的缺点,但为了保证程序的高效性,将需要反复进行的计算编成了 15 个子程序,在主程序的执行过程中不断调用各类子程序,从而提高了软件的运行效率。各子程序名称及实现的功能如下:

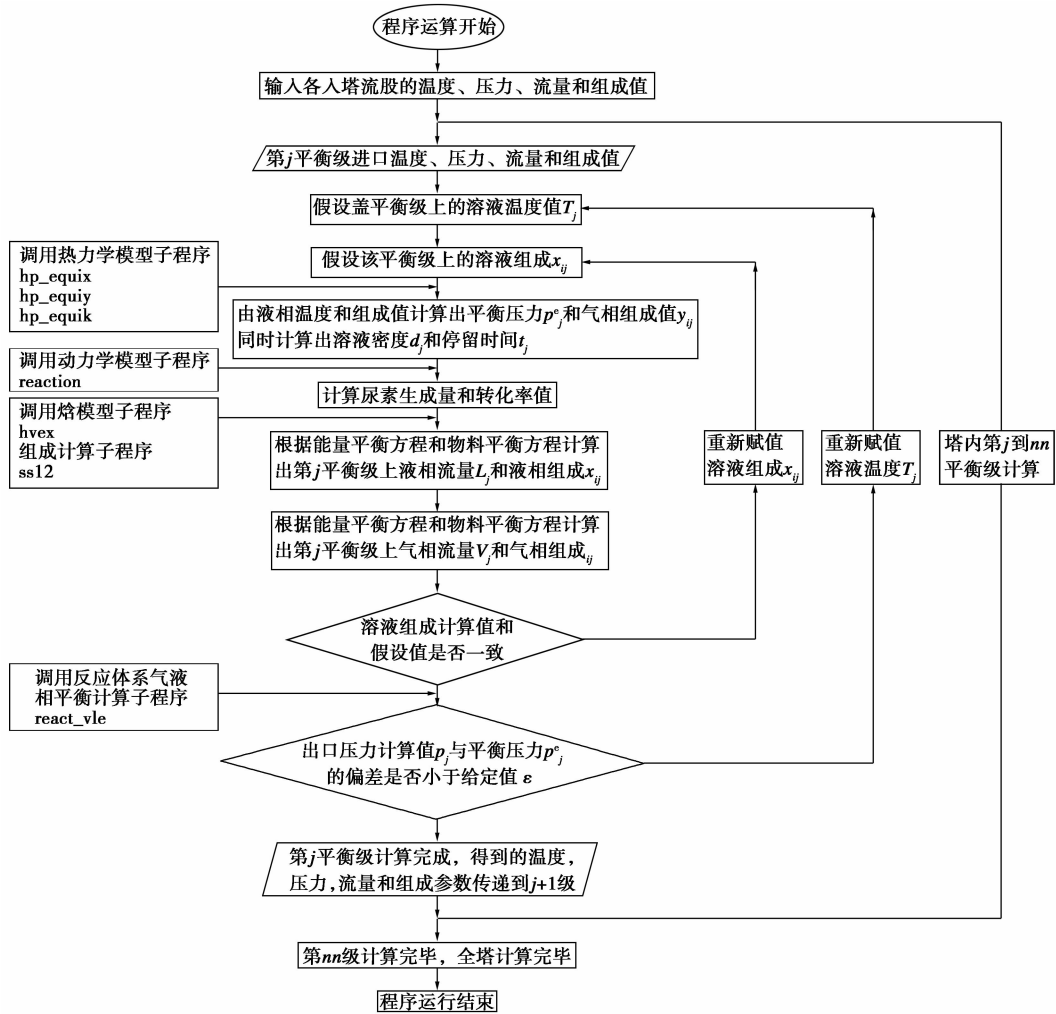


图1 主程序模拟计算框图

- (1) hp_equix 子程序。功能是计算合成塔内的反应达到气液相平衡时的液相组成。
- (2) hp_equiy 子程序。计算合成塔内的反应达到气液相平衡时的气相组成及平衡压力。
- (3) hp_equik 子程序。计算相平衡常数。
- (4) phs_fai 子程序。计算气相各组分的逸度系数。
- (5) gamax 子程序。计算液相各组分的活度系数。
- (6) hvex(ns) 子程序。判断气液相流股及焓值计算。
- (7) hvex1 子程序。液相流股的焓值计算。
- (8) hvex2 子程序。气相流股的焓值计算。
- (9) thmrg 子程序。由焓值计算流股温度。
- (10) tsmrg 子程序。由熵值计算流股温度。
- (11) reaction 子程序。尿素合成反应尿素生成量及反应停留时间的计算。
- (12) alfx 子程序。尿素合成反应转化率的

计算。

(13) over_react 子程序。全塔总转化率、总反应停留时间计算。

(14) react_vle 子程序。反应体系的气液平衡计算。

(15) actx 子程序。液相流股中反应后各组分含量计算。

2.2 软件界面的设计及实现

为了使软件可以在常用的 Windows 系统下使用,笔者选用 VB 来编制软件界面,利用 VF 来编制尿素合成塔主程序。因结合了 2 种语言的特点,使得最终的模拟软件既具有良好的模拟准确性,又具有优秀的人机交互界面。

通常在 VB 中调用 VF 主程序,需要将 VF 程序编译成动态链接库(DLL 文件)在 VB 中调用的方式。这种实现方法对一般的 VF 程序有效,但是对于该文述及的尿素合成塔模拟程序,因计算过程中需调用的函数很多,还包括了多流股数据的输入和

输出,同时在接口连接时需要根据不同子程序生成相应的 DLL 文件,在接口连接时易出错,而且与操作系统的兼容性不高。因而该文是将 VF 主程序编译成为 .exe 格式的应用程序,利用 VB 中的 Shell 函数启动 VF 应用程序,在整个运行过程中,VF 主程序都在后台运行。但这种调用方式中往往会存在程序的异步执行问题,即当 VB 中调用 VF 程序时会出现 VB 不等待 VF 程序结束而继续往下执行的问题。为了解决 Shell 函数异步执行问题,笔者利用了 Win32 API 提供的一些有关进程的操作函数解决了上述外壳程序的异步运行问题。

首先用 OpenProcess 函数建立外壳进程句柄,然后通过 WaitForSingleObject 函数等待外壳进程终止,外壳进程终止后用 CloseHandle 函数关闭打开的进程对象^[6]。这种方法极其简单,使得程序移植性更好。具体的 API 函数如下:

```
Private Declare Function WaitForSingleObject Lib
"kernel32" ( ByVal hObject As Long,
ByVal dwMilliseconds As Long) As Long
Private Declare Function CloseHandle Lib "
kernel32" ( ByVal hObject As Long) As Long
Private Declare Function OpenProcess Lib "
kernel32" ( ByVal dwDesiredAccess As Long,
ByVal bInheritHandle As Long, ByVal dwPro-
cessId As Long) As Long
Private Const INFINITE = -1&
Private Const SYNCHRONIZE = &H100000
调用外壳程序执行以及等待其终止的 VB 代码
如下:
Dim iTask As Long, ret As Long, pHandle
As Long
iTask = Shell ("d:\尿素合成\React.exe", vb-
NormalFocus)
pHandle = OpenProcess ( SYNCHRONIZE, False,
iTask)
ret = WaitForSingleObject ( pHandle, INFINITE)
ret = CloseHandle ( pHandle)
End Sub
```

此外,该软件还具有直接将计算结果实现绘图的要功能,通过调用保存在结果文件里的相关数据,可绘制尿素合成塔内温度沿塔高变化的曲线以及各关键组分组成沿平衡级变化的曲线,使得模拟结果更加简洁直观。

3 模拟软件效果分析

为了检验该软件的可靠性和模拟精度,笔者以《化肥工业丛书:尿素》一书中的工业生产数据为基础进行有关的计算,计算的结果与设计值对比如表 1 和表 2 所示。

表 1 尿素合成塔主要工艺参数计算结果误差

参数	计算值	设计值	误差/%
塔高/m	25.30	25.30	0
尿素转化率/%	61.93	62.00	-0.11
塔出口压力/MPa	19.52	20.10	-2.89
塔出口温度/°C	188.90	190.00	-0.58
合成塔出口气液态流股 总流量/kg·h ⁻¹	55718.32	55653.49	0.12

表 2 出合成塔各主要组分含量计算值与设计值的
误差分析

组分	计算值(质量分数)/%	设计值(质量分数)/%	误差/%
NH ₃	38.83	38.54	0.75
CO ₂	13.39	12.99	3.08
Urea	29.60	30.26	-2.18
H ₂ O	18.19	18.21	-0.11

从表 1 和表 2 可见,模拟软件对水溶液全循环法尿素合成塔的主要设计参数计算结果与设计值符合良好,误差值在合理范围内。为了模拟尿素合成塔改造的工况,笔者着重考虑了原料流股入塔混合程度和尿素合成塔内塔板效率 2 种因素对合成塔转化率的影响。

理论上,进入尿素合成塔的 3 股物料混合程度越好,塔内环境越接近混合均匀的拟均相,尿素合成塔的转化率就越高。经过北京航天动力研究所刘孝弟研究员的试验和研究发现,加装入口高效混合器(高压液气管式快速混合反应器)的尿素合成塔 CO₂ 转化率理论上可提高 3%~6%,该数据还通过了实际工业生产装置的实验验证^[1]。此外,当合成塔内塔板(塔内件)具有较高效率时,会使 3 股物流在塔内混合程度变好,从而可提高 CO₂ 转化率。利用该软件模拟了这种操作工况的影响。模拟结果如表 3 所示。

从表 3 可见,模拟结果与理论分析的趋势及试验结果相吻合,说明该软件可以为尿素合成系统工艺流程和设备的改造提供参考数据。

表3 塔板效率和混合程度对CO₂转化率的影响

混合程度或液滴直径/mm	CO ₂ 转化率/%
未安装高效混合器	61.92 ^①
0.25~0.30	64.30 ^①
0.20~0.24	65.37 ^①
0.15~0.19	65.98 ^①
未安装高效混合器	63.59 ^②
0.25~0.30	67.19 ^②
0.20~0.24	67.79 ^②
0.15~0.19	68.28 ^②

注:①塔板效率为50%~59%时;②塔板效率为60%~70%时。

4 结论和展望

该文以水溶液全循环法尿素合成工艺中的尿素合成塔为研究对象,对其进行了模拟计算。利用了VF语言编制了主计算程序,利用VB语言编制了界面程序,可以在windows下安装使用。通过对计算结果的分析可见,利用该文所采用的热力学、动力学及合成塔模型编写的VF主计算程序能够较为准确地模拟出水溶液全循环法尿素合成塔工况。对塔压、温度、转化率等主要参数的计算误差较小,在合理范围内。VB界面程序不但实现了与主程序的参数传递和调用,而且具有友好的人机交互界面和良好的绘图功能。软件整体能够满足水溶液全循环法尿素合成塔模拟计算的基本功能。今后,可以在采

集更多相关试验数据和现场数据的基础上完善尿素合成系统模拟数学模型的相关参数,进而编制完整的尿素合成高压工艺圈及尿素合成全流程模拟软件。

参考文献

- [1] 袁一. 化肥工业丛书:尿素[M]. 北京:化学工业出版社,1997:1-2.
- [2] 刘孝弟. 尿素合成均相反应理论的提出、实现和应用[J]. 化肥工业,2008,35(2):41-45.
- [3] 李玉刚,周传光,郑世清,等. 水溶液全循环法尿素生产流程模拟软件的开发[J]. 化学工程,1998,26(1):51-53.
- [4] 张香平,陈理,刘新彦,等. 尿素合成塔模拟计算[J]. 大连理工大学学报,2001,41(6):653-658.
- [5] 周庆伟,陈江. 尿素流程氨汽提塔的模拟[J]. 化工装备技术,2007,28(4):31-33.
- [6] 何萌,柴军瑞. VB与FORTRAN混合编程的两种方法及其比较[J]. 水电能源科学,2005,23(1):60-62.
- [7] 张学胜. 用VB和Fortran混合编程开发科学计算软件[J]. 计算机应用,2003,23(6):12-13.
- [8] 沈华民. 科技知识创新是技术创新之母:工业装置尿素合成反应过程之管窥[J]. 化肥设计,2008,46(4):3-9.
- [9] 沈华民. 尿素合成的化工计算:焓模型篇[J]. 中氮肥,2009(1):7-11.
- [10] 沈华民. 尿素合成的化工计算:动力学模型篇[J]. 中氮肥,2008(6):10-13.
- [11] 张香平. 尿素生产系统热力学研究及流程模拟开发[D]. 大连:大连理工大学,2002. ■

GPU 超级计算机在化工科研领域中的应用引人关注

1999年,英伟达™(NVIDIA®)公司发明了图形处理器(GPU),其并行处理能力能够将复杂的计算任务分割为数以千计可同时运行的较小任务,实现数十倍的数度提升。利用GPU和CPU打造的异构系统占地面积更少、消耗的功耗更低,使超级计算达到前所未有的低价格与大众化。在2010年12月21日北京举办的“2010 GPU高性能计算峰会”上,中科院过程研究所将GPU超级计算引入到化工科研领域所取得的成果引人关注。

NVIDIA公司总裁黄仁勋先生在会上表示:“GPU正在以一种深远的方式重新定义高性能计算,目前全世界最快的3台计算机中,有3台是基于GPU运算的,并且这个趋势必将得以保持。配备GPU的超级计算机正在逐步推动科研工作者发现效率的提升、协助解决全世界最复杂科学难题,同时也将广泛应用于各行各业的产品设计和研发中”。

随着经济与科学技术的发展,从航空航天装备研制、卫星遥感数据处理、气象预报、海洋环境数值模拟、石油勘探数据处理到生物医药研究、金融工程数据分析、新材料开发和设计、基础科学理论计算等,都会不同程度对高性能计算提出更高要求,而异构计算出现会很大程度上解决性能、成本、功耗等方面的难题。中科院过程研究所葛蔚教授的团队设计的Mole 8.5超级计算机采用了2200颗英伟达™ Tesla(NVIDIA® Tesla)20系列GPU,可实现207亿次浮点的计算,已经名列全球500强超大计算机的19位。2007年葛蔚教授开始将Mole 8.5超级计算机引用到离散粒子和分子动力学模拟研究,目前在工业设施的实施模拟、利用计算流体力学设计和优化多相与湍流工业反应器、利用计算多尺度多孔材料模拟来优化二次和三次采油及生物化学过程中的纳米和微米级流量模拟等方面取得了诸多进展,其应用前景十分广阔。(张立萍)