

间歇精馏过程的多目标综合优化研究

王传昌, 许保云, 艾波, 翟金国*, 李良君
(上海化工研究院精细化工研究所, 上海 200062)

摘要: 为了提高间歇精馏过程的综合效益, 需要对间歇精馏过程进行多目标优化。提出了一种基于均匀设计(UD)的间歇精馏过程多目标优化的方法。通过 Aspen 软件建立模型, 均匀设计安排试验方案并进行模型模拟, 利用 DPS 数据处理系统对模拟数据进行二次多项式拟合, 得到数学模型并预报最优操作参数, 使多目标均能达到最佳优化。并以乙醇-异丙醇二元体系分离过程作为研究案例, 得到单程收率为 52.92%, 操作时间 6.52 h, 相比初始模型验证实验结果, 收率提高 24.90%, 而操作时间在可接受范围之内, 达到了优化效果, 为今后间歇精馏过程多目标优化提供一种新的思路。

关键词: 间歇精馏; 多目标优化; Aspen 模拟; 均匀设计; 数学模型

中图分类号: TQ028

文献标志码: A

文章编号: 0253-4320(2017)05-0193-04

DOI: 10.16606/j.cnki.issn.0253-4320.2017.05.046

Study on multi-objective comprehensive optimization of batch distillation process

WANG Chuan-chang, XU Bao-yun, AI Bo, ZHAI Jin-guo*, LI Liang-jun

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

Abstract: In order to improve the comprehensive benefit of batch distillation process, the multi-objective optimization is needed to do on batch distillation process. In this paper, a method based on uniform design (UD) for multi-objective optimization of batch distillation process is presented. Model is created through Aspen software, and experiment scheme is arranged by uniform design and model simulation is carried out. And then the quadratic polynomial fitting on stimulation data are carried out by means of DPS data processing system, and mathematical model is obtained and optimal operating parameters are predicted, which makes multi targets all achieve the best optimization. The separation process of ethanol-isopropanol binary system is used as study example, showing that the single-pass yield is 52.92% and operation time is 6.52 h after optimization. Compared with the initial model experimental results, the yield has been increased by 24.9% and operating time is in the acceptable range, meaning that the optimization effect is achieved and it can provide a new idea for the multi objective optimization of batch distillation process in the future.

Key words: batch distillation; multi-objective optimization; Aspen simulation; uniform design; mathematical model

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,逐渐得到国内外专家学者的重视。由于间歇精馏的灵活性,被广泛应用于小批量、多组分、多产品和高附加值产品的分离提纯中^[1-4]。Tang 等^[5]在精馏塔结构方面进行优化,针对不同的混合体系采用不同的塔结构和操作方式。而最多的是对间歇精馏操作方式进行优化, Lopes 等^[6]以经济效益为目标函数,通过建立精馏数学模型,比较恒回流比和变回流比操作对经济效益的影响,通过比较,变回流比操作能够获得更大的经济效益。而 Safdarnejad 等^[7]对间歇精馏进行动态参数估计和优化,在保证产品纯度的要求下能够提高产品收率。Betlem 等^[8]通过对多元混合物分离过程中过渡馏分的循环利用来提高各个目标产品的收率。为了对间歇精馏操作过程进行全面优化,就需要对间歇精馏多目标优化。目前对间歇精

馏操作过程中多目标优化的报道很少,其中 Barakat 等^[9]采用遗传算法进行多目标优化,没有模型验证基础,仅从数学角度优化。Conradie 等^[10]通过利用神经网络优化,建立神经网络需要大量的案例。因此,探索间歇精馏过程更简单有效的多目标优化技术研究,获得最佳的操作参数,对于提高工业间歇精馏装置的经济效益具有理论和现实意义。

多目标优化^[9]是同时考虑到间歇精馏过程中2个或2个以上的目标函数得到最好效果的优化过程,而多个目标可能存在冲突,即当优化单目标时,优化结果只能是优化的目标函数取得最好优化效果,而其他目标函数不能得到优化。其主要关注的目标函数是精馏的收率、操作时间,所以在整个优化过程中,根据实际需要,权衡两者的重要性,使所获得的操作参数能够使收率、操作时间均在合理范围之内。

收稿日期:2016-10-31;修回日期:2017-03-08

作者简介:王传昌(1991-),男,硕士生,研究方向为化工过程传质与分离,chuanchangwang@163.com;翟金国(1975-),男,教授级高级工程师,主要从事化工装备开发、香料香精技术的中试及产业化等方面的工作,通讯联系人,oldzhai@163.com。

本文中提出了采用均匀设计的方法进行间歇精馏过程的多目标优化,通过 DPS 数据处理系统^[11]处理数据建立数学模型,得到最佳的操作参数。并以乙醇-异丙醇二元体系分离案例加以验证,探索该方法在实际优化过程中的应用情况。

1 Aspen 模型的建立及实验验证

1.1 Aspen 模型的建立

模拟乙醇-异丙醇二元体系分离过程所采用的是商业流程模拟软件 Aspen Plus 中的 BatchFrac 模块,在模拟过程中对模型做相应的简化^[12]:①模型中的塔板为理论塔板;②每块理论板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;④二元体系在整塔具有恒定的相对挥发度。

1.2 初始模型参数验证

在初始模型验证过程中,主要确定模型中可调整的参数,比如理论塔板数、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。

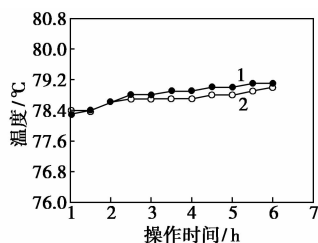
初始模型的验证在自主设计的精馏塔内进行,如图 1 所示。其中包括以下几个部分:①塔釜及导热油循环系统;②精馏塔体;③冷凝器及冷却水循环系统。塔体采用填料高度 1 m,内径为 33 mm 的不锈钢塔柱,内装 3.4 金属矩形螺旋圈不锈钢散堆填料,塔釜为 1 L 的不锈钢罐体,外套夹层,用于导热油加热塔釜。塔顶冷凝器内置蛇形冷凝管,采用循环冷却水系统。其中整塔在塔釜、塔身、塔顶以及导热油进出口、冷却水进出口处安装有温度传感器,塔釜和塔顶安装压力传感器,并显示塔顶塔釜压差。整套系统采用 DCS 控制并带有远传功能,同时可以屏幕显示,实验数据实时记录并自行存储。回流比用回流比控制器控制,塔顶采出样品用气相色谱仪 (Agilent7890B) 分析组成。



图 1 间歇精馏塔装置

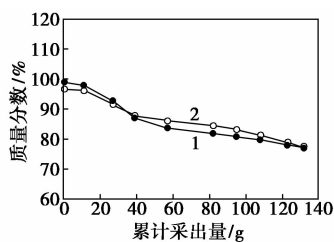
根据实验过程条件,通过调整模型中理论塔板数、冷凝器持液量和每块理论板的持液量,使模拟时过程参数和实验参数一致。实验与模拟过程的塔顶

温度随时间变化如图 2 所示,塔顶产品质量分数随采出量的变化如图 3 所示。



1—模拟温度;2—实验温度

图 2 模型和实验塔顶温度随时间的变化



1—模拟质量分数;2—实验质量分数

图 3 塔顶产品瞬时浓度随着累积采出量的变化

从图 2 的温度随时间的变化可以得到,模拟和实验过程的塔顶温度变化趋势一致,整个过程经历全回流、小回流比阶段和过渡馏分阶段,符合实际情况。图 3 中可以看出,根据操作过程,塔顶产品中乙醇的质量分数变化趋势是先下降快,然后在增大回流比后,缓慢下降,并且实验和模拟结果趋势一致。图 2 中模拟与实验之间的相对误差在 0 ~ 0.25%,图 3 中相对误差在 0.33% ~ 3.19%。所有模拟与实验数据之间的相对误差均可接受,选择 NRTL 热力学模型以及模型简化对本工艺流程模拟是可行的,可以在此模型基础上进行二元体系分离过程的优化。

2 均匀试验设计与模型模拟

均匀设计是一种只考虑试验点在试验范围内均匀散布的一种试验方法,与正交试验设计类似。但由于均匀设计只考虑试验点的“均匀分散”而不考虑“整齐可比”,因而可以大大减少试验次数,同时由均匀设计安排的试验点在整个试验范围内分布合理,能够充分代表整个试验数据范围内的情况^[13-15]。

2.1 优化参数的确定

在间歇精馏过程中,影响精馏结果的因素有很多,为了降低精馏过程控制的难度,减少精馏过程的波动性,选择几个对单程收率、操作时间影响比较大

的因素作为优化参数。

在优化过程中固定部分设计参数和操作参数,如理论板数 24 块,塔顶压力是 101.325 kPa,全塔压差是 650 Pa,冷凝器持液量是 0.011 kg,每块塔板持液量是 0.001 8 kg,整个分离过程分为 3 个阶段,依次是全回流阶段、小回流比阶段和过渡馏分阶段。重点研究小回流比阶段的回流比、塔顶产品采出率,过渡馏分阶段的回流比、塔顶产品的采出率对产品单程收率、操作时间的影响。

2.2 均匀试验设计与模拟结果

均匀试验设计是一种试验安排方法,由于它考虑到因素间的交互作用,对于间歇精馏过程优化有很好的适用性。

根据经验,同时为了保证塔系统安全有效地运转,确定各待优化参数的取值范围,如表 1 所示。

表 1 待优化参数取值范围

待优化参数	优化范围
小回流比阶段回流比 x_1	0.7 ~ 3.5
过渡馏分阶段回流比 x_3	5 ~ 10.2
小回流比阶段采出率 $x_2/(g \cdot h^{-1})$	20 ~ 41
过渡馏分阶段采出率 $x_4/(g \cdot h^{-1})$	15 ~ 29

在试验方案安排过程中,选用 $U_8^*(8^5)$ 的均匀设计表进行本次模拟的均匀试验设计,设计方案及模拟结果列于表 2。

表 2 $U_8^*(8^5)$ 试验方案安排表及模拟结果

$U_8^*(8^5)$	x_1	x_2	x_3	x_4	y_1	y_2
1	0.7	23	7.4	29	49.44	6.99
2	1.1	29	10.2	27	53.16	7.41
3	1.5	35	6.6	25	47.04	6.75
4	1.9	41	9.6	23	52.54	7.74
5	2.3	20	5.8	21	43.50	7.96
6	2.7	26	8.8	19	51.56	9.31
7	3.1	32	5.0	17	38.23	7.08
8	3.5	38	8.2	15	50.52	10.03

注: x_1 为小回流比阶段回流比; x_2 为小回流比阶段塔顶产品采出率, g/h; x_3 为过渡馏分阶段回流比; x_4 为过渡馏分阶段塔顶产品采出率, g/h; y_1 为单程收率, %; y_2 为操作时间, h。

3 多目标函数优化

在进行多目标优化过程中需要对多个目标函数进行优化趋势一致性处理,即将所有目标函数变成求最大值,所采用的方法是 $y = 1/y_0$,同时对多个目

标函数进行变换求隶属度,其中定义隶属度公式为: $y_n = (y - y_{\min}) / (y_{\max} - y_{\min})$ 。采用隶属度概念就是为了使目标函数统一量纲,将所有目标函数值均变换成同数量级,即数值变成在 0 ~ 1 之间。

3.1 权重

权重就是要在多个目标函数之间做重要性评价,根据目标函数的重要性给予权重的计算值或专家推荐值,这样就可以将多个目标函数值转化为单目标函数值。就乙醇-异丙醇二元体系分离而言,单程收率最重要,并通过权重系数计算,所以给予 2 个目标函数的权重依次是单程收率是 0.8,操作时间是 0.2,即 $y = 0.8 * y_1 + 0.2 * y_2$ 。

3.2 数据拟合

模拟结果经过隶属度、权重的转化变换后,如表 3 所示。

表 3 经过变形后的数据

序号	x_1	x_2	x_3	x_4	y
1	0.7	43	7.4	29	0.780
2	1.1	49	10.2	27	0.946
3	1.5	55	6.6	25	0.672
4	1.9	61	9.6	23	0.889
5	2.3	40	5.8	21	0.389
6	2.7	46	8.8	19	0.746
7	3.1	52	5.0	17	0.172
8	3.5	58	8.2	15	0.659

利用 DPS 数据处理系统对表 3 数据进行二次多项式拟合,要求总目标值最大,拟合结果:

$$y = -1.71 + 0.455x_3 - 0.02267x_3 * x_3 + 0.00032x_4 * x_4 + 0.00017x_2 * x_4$$

所得到的最佳操作参数组合是 $x_1 = 3.4, x_2 = 41, x_3 = 10, x_4 = 29$,数学模型预报的统计计算值。相关系数 $Ra = 0.9988, F = 315.7809, P = 0.0003$,剩余标准差 $S = 0.0192$,调整后的相关系数 $Ra = 0.9972$,Durbin-Watson 统计量 $d = 2.015$,说明模型稳定。在数学模型中只有 x_2, x_3, x_4 ,即小回流比阶段采出率、过渡馏分阶段回流比和过渡馏分阶段采出率对单程收率和操作时间有影响。通过数学模型可以看出, x_3 和 $x_3 * x_3$ 的系数相对比较大, $x_4 * x_4$ 系数次之,而 $x_2 * x_4$ 的系数最小,更能说明不同操作参数对目标函数的影响不同,系数越大,影响程度越大,所以过渡馏分阶段回流比和采出率对整个过程的收率和操作时间影响更大,根据实际分离过程分析和实验情况相符。将参数组合进行 Aspen 模型

模拟,所得到的 2 个目标函数值是单程收率 52.92%,操作时间 6.52 h。经过变换处理后得到 $y = 0.989$,模拟值与数学模型预报值相对误差为 5.27%,在可接受范围内。

3.3 最佳操作参数组合实验验证

通过 DPS 数据处理系统所拟合的多项式预报值经过模型验证后,同样要经过实验验证,才能证明预报值的准确性。在实验验证过程中,在 $x_1 = 3.4$, $x_2 = 41$, $x_3 = 10$, $x_4 = 29$ 条件下,进行 2 次实验,实验结果与模型结果如表 4 所示。

表 4 模型和实验验证预报值一览表

	单程收率/ %	相对误差/ %	操作时间/ h	相对误差/ %
模拟值	52.92		6.52	
第一次实验值	53.76	1.56	6.34	-2.84
第二次实验值	54.71	3.27	6.73	3.12

注:相对误差 = (实验值 - 模拟值) * 100 / 实验值。

在表 4 中可以看出,2 次实验的单程收率与模拟值之间的相对误差均在 4% 以内,操作时间与模拟值之间的相对误差最大为 3.12%,在可以接受的范围内。

3.4 结果与讨论

对于间歇精馏过程,通常是希望能够实现利益最大化,即要求单程收率最高,操作时间最短,但是往往多个目标之间存在相互矛盾,不能同时达到要求,在实际过程中,出于不同的目的,优化的重点也不一样,所以本文中所采用 UD 优化方法能够做到同时对多目标进行综合优化。从表 4 可以看出,在单程收率权重系数为 0.8,操作时间的权重系数为 0.2 的情况下,通过 DPS 数据处理系统中二次多项式拟合所得到的数学模型预报值 $x_1 = 3.4$, $x_2 = 41$, $x_3 = 10$, $x_4 = 29$ 时,所得到的 2 个目标函数值经过模型验证和实验验证,相对误差均在可接受范围内。

4 结论

提出了基于 UD 优化间歇精馏过程多目标的方法,通过乙醇-异丙醇二元体系作为实验研究案例,探索该方法对间歇精馏过程多目标综合优化的效果,从 Aspen 模型的验证到数学模型的建立,再到模型和实验验证数学模型的预报值,从而得到采用 UD 方法结合数学建模工具能够对间歇精馏过程多目标优化起到很好的效果,对于乙醇-异丙醇二元体系而言,得到单程收率为 52.92%,操作时间

6.52 h,相比于初始模型验证实验结果中收率的 39.74% 和操作时间 6.3 h,该方法起到了综合优化的作用,即单程收率提高了 24.90%,而操作时间又可以接受,该方法为今后的间歇精馏过程多目标综合优化提供一种新的思路。

致谢:感谢上海化工研究院徐静安教授、吴高胜工程师对本文的指导和帮助!

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] Tang Ke, Bai peng, Li Guangzhong. Total reflux operation of multivessel batch distillation for separation of binary mixtures [J]. Chinese Journal of Chemical Engineering, 2014, 22(6): 622 - 627.
- [6] Lopes M M, Song T W. Batch distillation: Better at constant or variable reflux? [J]. Chemical Engineering & Processing, 2010, 49(12): 1298 - 1304.
- [7] Safdarnejad S M, Gallacher J R, Hedengren J D. Dynamic parameter estimation and optimization for batch distillation [J]. Computers & Chemical Engineering, 2015, 86: 18 - 32.
- [8] Betlem B H L, Krijnsen H C, Huijnen H. Optimal batch distillation control based on specific measures [J]. Chemical Engineering Journal, 1998, 71(71): 111 - 126.
- [9] Barakat T M M, Fraga E S, Sørensen E. Multi-objective optimisation of batch separation processes [J]. Chemical Engineering & Processing, 2008, 47(12): 2303 - 2314.
- [10] Conradie A V E, Aldrich C. Neurocontrol of a multi-effect batch distillation pilot plant based on evolutionary reinforcement learning [J]. Chemical Engineering Science, 2010, 65(5): 1627 - 1643.
- [11] 唐启义. DPS 数据处理系统 [M]. 北京: 科学出版社, 2007.
- [12] 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.
- [13] 董敬莎, 孙晓燕, 牛博英. 正交和均匀实验设计方法的比较 [J]. 科技视界, 2013, (22): 78 - 78.
- [14] 方开泰. 正交与均匀试验设计 [M]. 北京: 科学出版社, 2001.
- [15] 许保云, 李虎林, 袁家均, 等. 轻同位素分离级联系统的简捷设计 [J]. 同位素, 2010, 23(4): 193 - 196. ■