

基于 SIMULINK 系统的间歇萃取精馏动态模拟

韩 檬^{1,2}, 高建东², 张曙光², 谭 欣¹

(1. 天津大学环境科学与工程学院, 天津 300072; 2. 天津泰达环保有限公司, 天津 300350)

摘要: 间歇萃取精馏属于非理想性极强的非稳态过程, 很难找到一种快捷有效且易于执行的求解方法。基于此, 分别建立了全回流开工、加溶剂全回流及产品采出 3 个阶段的平衡级动态模型, 编写 S 函数将该模型求解过程嵌套于 SIMULINK 模块中, 并在此基础上开发了间歇萃取精馏的动态模拟平台。通过将不同解法与实验值进行对比, 确定了该研究条件下动态模型的求解策略: ODE45 解法适于求解全回流开工和加溶剂全回流动态模型; ODE 15s 解法和 ODE 23s 解法适于求解产品采出动态模型, 其中 ODE 23s 的计算过程相对更快捷。

关键词: SIMULINK; 间歇萃取精馏; 动态模拟

中图分类号: TQ018; TQ657.6

文献标识码: A

文章编号: 0253-4320(2009)06-0066-03

Dynamic simulation of batch extractive distillation with SIMULINK

HAN Meng^{1,2}, GAO Jian-dong², ZHANG Shu-guang², TAN Xin¹

(1. School of Environment Science and Technology, Tianjin University, Tianjin 300072, China;

2. Tianjin TEDA Environmental Protection Co., Ltd., Tianjin 300350, China.)

Abstract: Batch extractive distillation (BED) belongs to an unsteady state where the feed is strongly non-ideal. While a solution which is effective, quick and easy to run is hard to find out. Faced with this problem, some of equilibrium dynamic models of BED with mixed solvents are respectively built such as the total reflux start stage, total reflux with solvent stage and product distilled stage in this paper. The dynamic models and the process for solutions are implemented through S-function, embedded in SIMULINK model. Hence a dynamic simulative platform is developed for BED based on SIMULINK. Through comparison with different solutions, it can be concluded that ODE45 is fit for the resolving of the total reflux start stage and total reflux with solvent stage; ODE15s and ODE23s are fit for the resolving of product distilled stage and ODE23s is correspondingly quicker.

Key words: SIMULINK; batch extractive distillation; dynamic simulation

间歇萃取精馏是迎合当代化学工业发展特点的新兴工艺, 因此, 关于其过程的实验数据库还十分匮乏, 至于模拟问题也没有展开十分具体深入的研究。但是由于其自身的突出优点, 决定了间歇萃取精馏分离工艺必然将在精细化工、制药提纯、石化深加工等化学工业领域有着极其广泛的应用前景。伴随过程机理、模型模拟及操作优化等相关方面研究的不断进展, 间歇萃取精馏分离工艺终究会成为化学工业越来越重要的环节。

间歇萃取精馏过程是非稳态操作过程, 且整个物系非理想性极强, 待求解的各微分方程式的时间常数在很大的范围内变化, 属于刚性微分方程组, 必须使用高稳定的数值积分方法。另外, 合适的积分步长的选择也至关重要, 关系到整个计算过程的精度、稳定性及运算时间。因此, 接近真实过程的间歇萃取精馏模拟及其数学模型的积分求解将是今后相关研究的重点, 快捷有效且易于执行的数值积分求解过程也是该模拟研究急待解决的问题。在目前的

研究结果中, 间歇萃取精馏的数学模型主要是建立在平衡级假设的基础上, 模拟求解的过程相对繁琐, 需要计算者必须兼具数值积分及精馏动态过程变化的相关专业基础知识^[1-8]。

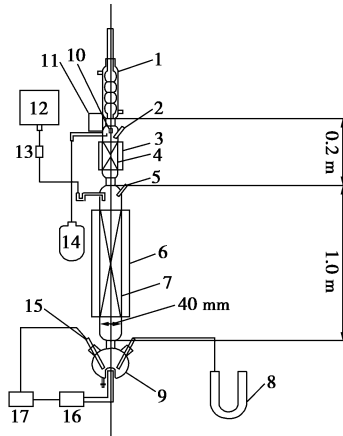
基于 MATLAB 平台的 SIMULINK 系统是一种用来实现计算机仿真的软件工具, 它可以模拟几乎所有可遇到的动态系统, 除提供了种类丰富的基本模块外, 还允许用户很方便地定制自己的模块和模块库(S 函数模块)。SIMULINK 可以自动完成所有细节性问题, 包括各个模块在运行时如何执行、时间如何采样、事件如何驱动等, 为用户提供了极大的便利。近年来, 人们已经开始使用 SIMULINK 对精馏过程的动态变化进行模拟^[9-11], 但对于分离强非理想性物系的间歇萃取精馏过程, 相关的动态仿真研究尚未见文献报道。

由此, 笔者对间歇萃取精馏过程的 SIMULINK 模拟进行了研究, 建立了相应的动态仿真平台并重点讨论了其合理的求解策略, 为后续的深入研究

奠定了基础。

1 实验部分

笔者以共沸物系乙腈-甲苯为研究对象,经过大量前期研究工作后确定异丙苯为较佳萃取溶剂。实验采用共沸组成附近的乙腈-甲苯混合物为原料,原料量 300 mL,溶剂摩尔比为 1:1,回流比为 2。实验流程如图 1 所示。



1—冷凝器;2,5,15—测温管;3—精馏段;4,6—电加热保温带;
7—萃取段;8—U型管压差器;9—再沸器;10—回流比控制器;
11—电磁线圈;12—高位槽;13—控制阀门;14—接收瓶;
16—电加热装备(电热棒);17—电磁继电器

图 1 实验流程示意图

实验过程中,塔底为订做的 2 000 mL 三口烧瓶,分别连接温度计、U 型压差计及塔体,采用电加热棒加热;烧瓶底部有釜液出料口,用阀门控制;精馏塔体采用内径 40 mm 的玻璃柱,内装 3 × 3 θ 环填料;萃取段高 1.0 m,精馏段高 0.2 m,中间有溶剂进料口。经标定后可知全塔理论板数约为 25 块。

2 研究结果与讨论

2.1 动态仿真平台的建立

本文采用平衡级恒体积持液模型进行了间歇萃取精馏的模拟,将整个操作周期内的间歇萃取精馏动态模型分为 3 部分:①全回流开工动态模型。计算全回流操作的瞬时特性,为状态变量提供比较好的初值。②加溶剂全回流动态模型。以上一操作状态结果为初值,计算加溶剂全回流操作的动态变化过程。③产品采出动态模型。以上一操作状态结果为初值,计算产品采出过程的动态变化。由于篇幅所限,对整个过程的微分方程组不另列出。

SIMULINK 中的解法大致可以分为 2 类:变步长解法和固定步长解法。变步长解法可以在仿真过程

中改变积分步长,且提供了错误控制和零值通过检测。这类算法会依照给定的精确度在各积分区间内很聪明地自己寻找最大步长进行积分,从而使得效率最高,因而不必用限定步长的方法来获得解的光滑曲线。本文为提高求解效率选择变步长解法。

SIMULINK 中的变步长解法及说明经本文整理后列于表 1。

表 1 SIMULINK 数值解法表

算法	算法简介
ODE45	通常情况下是最好的单步解法。此解法基于 Dormand-Prince 4-5 阶的 Runge-Kutta 算法。ODE45 为默认解法,通常也是第一选择,但不适于刚性系统
ODE23	基于 Bogacki-Shampine 2-3 阶 Runge-Kutta 算法,对相同的精度,它需要比 ODE45 更小的步长。不适于刚性系统
ODE15s	针对刚性系统的变阶次多步解法,此解法由 Gear 法改进而来,是最新的数值差分方法。目前在工程领域中的实际应用表明,此法比 Gear 法的效果更好 ^[12-14]
ODE23s	针对刚性系统的固定阶次单步解法。由于是单步解法,因此有时比 ODE15s 快一些,但精度相对较低。如果系统是刚性系统,可以同时尝试 2 种方法,以确定哪一个更快
ODE23t	符合梯形规则的隐式 Runge-Kutta 算法,精度较低,但计算速度非常快捷。只适用于中等刚性的系统
ODE23tb	TR-BDF2 法,即采用梯形规则的隐式 Runge-Kutta 算法与二阶 Gear 算法构成的混合算法,对刚性系统精度要求不高时可尝试此法

本文所建立的间歇萃取精馏变步长 SIMULINK 仿真平台如图 2 所示,界面上的 Scope 模块显示了积分变量随时间的变化趋势,Display 模块显示了模拟过程中积分步长的变化。由于 SIMULINK 中并没有类似精馏系统模拟这样的特殊模块,本文编写了 S 函数将平衡级动态模型的求解过程嵌套于 Dynamic Simulation 模块中,该模块为整个仿真平台的核心。

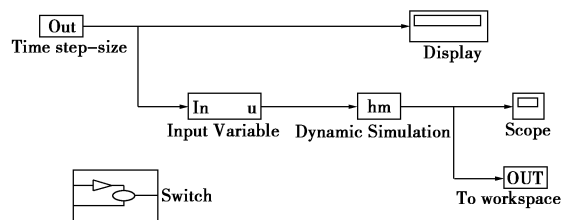


图 2 间歇萃取精馏动态模拟平台

2.2 模拟结果与讨论

基于图 2 所示的 SIMULINK 平台,本文首先选用 ODE45 和 ODE15s 两种解法进行了全回流过程及

加溶剂全回流过程的动态模拟。结果证明:默认的 ODE45 解法可以顺利地求解全回流动态模型,模拟结果与 ODE15s 相同但积分步长为后者的 10 倍以上,因而相对更加快捷有效。模拟结果如图 3 及图 4 所示。

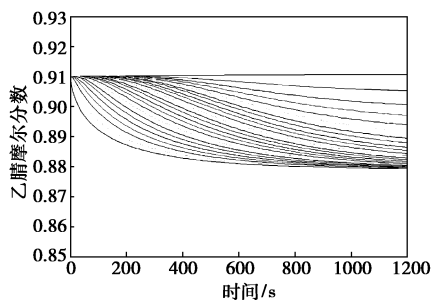


图 3 全回流条件下塔内乙腈浓度的动态变化

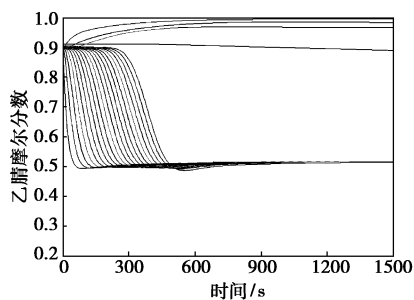


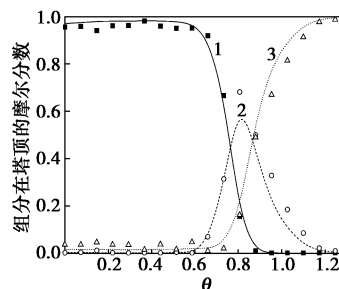
图 4 加溶剂全回流条件下塔内乙腈浓度的动态变化

图 3 及图 4 中所示为塔内各级理论板上轻组分乙腈摩尔分数的动态变化。由图 3 可知,全回流条件下全塔浓度在几十分钟后趋于稳定,塔釜中的乙腈纯度最高且与进料浓度相差不大。塔顶乙腈浓度最低为共沸组成,与实验结果基本一致。由图 4 可知,在塔内加入溶剂后,全塔浓度发生了巨大的变化。萃取段各级理论板上的乙腈浓度急剧下降,而精馏段各级理论板上的乙腈浓度明显升高,之后逐渐趋于稳定。可知加入溶剂后,乙腈对甲苯相对挥发度的显著提升使精馏段内乙腈浓度大大升高。相比之下,溶剂进料板以下的萃取段则由于大量溶剂的加入造成原料组分浓度的降低。

对于产品采出阶段,本文首先采用普通的 ODE45 和 ODE23 解法对该过程进行了动态模拟,结果发现:计算过程启动不久就会发生失败,结果不收敛。这可能是由于塔顶开始采出产品后,塔顶产品量突然增大,塔内液相速率及浓度出现一个较大的振荡,造成系统刚性增大,结果难以收敛。而当选用针对刚性系统的 ODE15s 和 ODE23s 解法时,计算过程不仅可以顺利进行,计算结果也与实验值吻合较

好。对 2 种解法进行对比发现,两者的计算结果偏差在 $10^{-4} \sim 10^{-5}$,基本一致,但 ODE23s 的积分步长是 ODE15s 的 2 倍以上,为 0.2 ~ 0.3 s,因而可以更快地对过程进行求解。

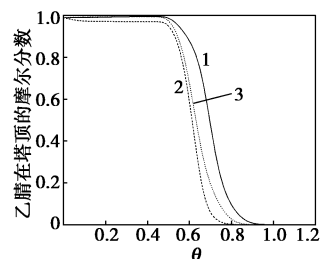
图 5 为采用 ODE23s 解法所得到的产品采出过程塔顶采出物浓度与实验值的比较, θ 为采出液对原料液的体积分数。由图中可以看出,计算结果与实验值吻合较好。



1—组分乙腈的计算值;2—组分甲苯的计算值;
3—组分异丙苯的计算值;■—组分乙腈的实验值;
○—组分甲苯的实验值;△—组分异丙苯的实验值

图 5 塔顶采出物浓度计算值与实验值的比较

此外,本文还分别采用 ODE23t 和 ODE23tb 两种解法对产品采出阶段的间歇萃取精馏过程进行了模拟。图 6 为采用 ODE23s、ODE23t 和 ODE23tb 三种不同解法得到的塔顶乙腈浓度的结果比较。由图 6 可知,ODE23t 和 ODE23tb 两种解法的结果相对较接近,可以对产品采出阶段进行动态模拟,但和 ODE23s 相比,与实验值的偏差较大,因而不是计算本文中产品采出阶段间歇萃取精馏动态模型的理想解法。



1—ODE23s;2—ODE23t;3—ODE23tb

图 6 塔顶乙腈浓度不同解法计算值的比较

3 结论

(1)使用 SIMULINK 系统实现了间歇萃取精馏过程的动态模拟并设计开发了使用界面良好的动态模拟平台。

(下转第 70 页)

和油气结焦等问题。为此笔者在对沉降器的演变、油气的二次裂化反应、油气的停留时间、油气结焦等问题分析的基础上,指出沉降器存在的弊病,提出了无沉降器催化裂化工艺(Non Disengager Fluid Catalytic Cracking, NODFCC)装置的设想,以期能从装备结构上提高催化裂化工艺技术的水平。

1 沉降器功能的蜕变

世界上第一套催化裂化工业装置诞生于 1936 年,采用固定床反应器和小球催化剂,催化裂化反应和催化剂再生为间歇式操作。20 世纪 40 年代初出现了移动床(Thermofor Catalytic Cracking, TCC),同时也开发了流化床催化裂化技术(Fluid Catalytic Cracking, FCC),流化催化裂化工艺的催化剂分别采用小球催化剂($\Phi 2 \sim 4 \text{ mm}$)和微球催化剂($\Phi 20 \sim 100 \mu\text{m}$),采用再生器与沉降器两器循环催化剂进行反应和再生,实现了连续式操作,其中油气的反应是在反应器的密相床层内进行的。20 世纪 60 年代初,分子筛催化剂的开发成功,极大地促进了流化催化裂化技术的发展,以提升管为反应器的各种类型的催化裂化装置相继投入工业生产并应用至今,完全取代了密相床层反应的流化催化裂化工艺。我国第一套密相流化床催化裂化工业装置于 1965 年 5 月在中国石油抚顺石油二厂建成投产,第一套提升管

反应器催化裂化工业装置于 1974 年 8 月在中国石油玉门炼油厂成功运转^[4]。

沉降器在催化裂化工艺中的作用与催化裂化工艺的发展密切相关。回顾催化裂化工艺的发展历程,沉降器的作用随着催化剂的发展,其功能也在发生变化。由于催化剂由微球合成硅铝催化剂发展到分子筛催化剂,催化剂活性大大提高,对于分子筛催化剂这种快速失活的催化反应体系而言,反应时间由几分钟缩短到几秒,早期流化催化裂化装置的密相床层反应器(图 1)不再进行油气的反应,目前的作用仅仅作为催化剂颗粒的沉降空间,已经演变为沉降器(图 2)。油气的反应过程由密相床层反应转变为快速床反应,反应地点由沉降器转移至提升管反应器内。原来反应器的功能蜕变为一个包容旋风分离器的压力、保温空间,已经失去了原来作为反应器的作用。

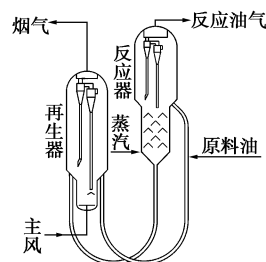


图 1 IV 型催化裂化工艺流程

(上接第 68 页)

(2) 通过将不同解法与实验值进行对比,确定了本文研究条件下动态模型的求解策略: ODE45 解法适于求解全回流开工和加溶剂全回流动态模型; ODE15s 解法和 ODE23s 解法适于求解产品采出动态模型,其中 ODE23s 的计算过程相对更快捷。

参考文献

- [1] Hua Chao, Li Xingang. Design and operation of batch extractive distillation with two reboilers[J]. Chinese Journal of Chemical Engineering, 2007, 15(2): 286 - 290.
- [2] Mehlhorn A, Nougues José M. Using rate-based approach under consideration of different contacting regimes for multicomponent batch distillation simulation[J]. Comput Chem Eng, 1998, 22: S645 - S648.
- [3] Lang P, Modla G, Lelkiz Z. Homoazeotropic distillation of maximum azeotropes in a batch rectifier with continuous entrainer feeding: II. Rigorous simulation results[J]. Comput Chem Eng, 2000, 24(2/3/4/5/6/7): 1429 - 1435.
- [4] Rodriguez-Donis I, Pardillo-Fontdevila E. Synthesis experiments and simulation of heterogeneous batch distillation processes[J]. Comput Chem Eng, 2001, 25(4/5/6): 799 - 806.
- [5] Schneider R, Noeres C. Dynamic modeling and simulation of reactive batch distillation[J]. Comput Chem Eng, 2001, 25(1): 169 - 176.
- [6] Wang L, Li P, Wozny G. A startup model for simulation of batch distillation starting from a cold state[J]. Comput Chem Eng, 2003, 27(10): 1485 - 1497.
- [7] Tapp M, Kauchali S, Hausberger B. An experimental simulation of distillation column concentration profiles using a batch apparatus[J]. Comput Chem Eng, 2003, 58(2): 479 - 486.
- [8] 崔现宝. 带有中间储罐塔的间歇萃取精馏的研究[D]. 天津: 天津大学, 2002.
- [9] 罗祎青. 氢同位素低温精馏动态过程模拟研究[D]. 天津: 天津大学, 2002.
- [10] 魏奇业. 基于 MATLAB/SIMULINK 的间歇精馏模拟研究[J]. 吉林化工学院学报, 2003, 20(2): 1 - 3.
- [11] 韩莉果. 化学交换法分离硼同位素的模拟与实验研究[D]. 天津: 天津大学, 2006.
- [12] Madhusudana R R. A distributed dynamic model for chronoamperometry, chronopotentiometry and gas starvation studies in PEM fuel cell cathode[J]. Chem Eng Sci, 2006, 61: 7393 - 7409.
- [13] Oscar A O. Dynamic simulation of a pilot rotary kiln for charcoal activation[J]. Comp Chem Eng, 2005, 29: 1837 - 1848.
- [14] Crowther A R. The torsional finite elements and nonlinear numerical modelling in vehicle powertrain dynamics[J]. Journal of Sound and Vibration, 2005, 284: 825 - 849. ■