

基于遗传算法的反应精馏塔的综合与设计

冯竹君*, 吴晨露, 谢沈强, 胡文泽

(北京化工大学信息科学与技术学院, 北京 100029)

摘要: 基于遗传优化算法, 提出了一种适用于反应精馏系统的综合与设计方法: 以经济指标 TAC 最小值为目标, 总塔板数、进料位置、回流比、滞液量等作为决策变量, 并采用遗传优化算法对决策变量进行优化计算并搜索出最优操作点, 实现反应精馏系统的经济效益最大化。利用醋酸甲酯的反应精馏系统来评价所提出的设计策略, 结果表明, 该设计实例能在保证产物摩尔分数达到要求的前提下, 获得总体效益最大的设计系统, 说明该设计方法可以设计出较好的反应精馏塔。

关键词: 遗传算法; 反应精馏; 综合设计

中图分类号: TQ021.8

文献标志码: A

文章编号: 0253-4320(2016)07-0186-03

DOI: 10.16606/j.cnki.issn.0253-4320.2016.07.046

Synthesis and design of reactive distillation columns based on genetic algorithm

FENG Zhu-jun*, WU Chen-lu, XIE Shen-qiang, HU Wen-ze

(College of Information Science and Technology, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China)

Abstract: Based on genetic algorithm (GA), a generalized method is proposed for the synthesis and design of reactive distillation process. The minimum of total annual cost is set as objective function. The total number of trays, feed locations, reflux ratio, liquid holdup, and so on, are used as decision variables. Optimization calculation is conducted by using the genetic algorithm to get the optimal operating point for maximum economic benefits. Methyl acetate reactive distillation process is employed to evaluate the proposed design strategy. The results indicate that the best overall benefit scheme can be obtained on the premise of attaining qualified product purity. This proposed approach is better for reactive distillation column design.

Key words: genetic algorithm; reactive distillation; synthesis and design

反应精馏(RD)是将化学反应和精馏过程有机地耦合在一起的过程装置,通过反应与分离的相互促进,大幅度地提高反应选择性和转化率。对RD过程的研究包括模拟、控制 and 设计。其中,RD过程的设计包括设计参数和操作条件的决定,在综合考虑经济效益、安全性、环保和操作限制的情况下,优化而定。现有的RD系统的综合设计方法主要有图解法,优化法等^[1]。图解法是根据反应和精馏过程的特点,结合公式和实验数据绘制算图进而直观快速地获得RD塔的结构和操作参数,在一定条件下可以对二元、三元甚至四元RD塔进行系统结构的综合与设计,但对于多维物系,由于系统的复杂性,应用起来却非常困难^[2]。优化设计法是以一定的设计要求如经济性作为目标函数,以理论板数、回流比等作为决策变量进行优化计算,通过复杂的模型化和优化计算来获得局部或全局最优的设计变量^[3]。目前提出的优化设计法可细分为3类:混合整数非线性规划法、有限元正交排列法和混合整数动态优化法。考虑到RD系统的设计中涉及的变量较多,模型的建立较复杂,计算量大等因素,为了使RD系统的综合设计方法具有更高的通用性和便捷性,将遗传算法应用到RD的综合设计当中。遗传

算法(GA)是一种近年来得到广泛应用的全局优化算法,既避免了传统算法容易陷入局部最优的缺点,而且其迭代的收敛速度和精度受参数初值设定的影响较小^[4]。

本文中基于遗传优化算法,提出了一种适用于RD塔的综合与设计方法,并给出了醋酸甲酯的反应精馏综合设计实例。

1 基于遗传算法的反应精馏塔的综合与设计方法

1.1 建立RD塔优化模型

理想的四元反应 $A + B \rightleftharpoons C + D$ 的RD塔结构如图1所示^[5]。从图1中可以看出,RD塔被分为3个部分,1和3是精馏段和提馏段,主要用于产物与杂质的分离。2在2股进料之间,是反应段,

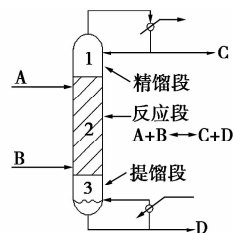


图1 反应精馏工艺模型

代表反应操作和分离操作之间的耦合。塔顶安装全冷凝器(模拟仿真运算时当作第一块塔板),塔底安装部分再沸器(模拟仿真运算时当作最后一块塔板)。

一般情况下,反应精馏塔的综合设计要求在保证产品纯度达到指定要求的前提下,最大限度地降低费用或能耗。因此,优化模型以年总操作费用(TAC)为目标函数,如下式:

$$f = \min(TAC) \quad (1)$$

$$TAC = \text{energy cost} + \text{capital cost}/\text{payback period} \quad (2)$$

其中,TAC由2部分组成:一是以蒸汽费用、冷却水费用和催化剂费用所决定的操作费用(energy cost);二是以塔板数、塔高、换热器面积等决定的设备费用(capital cost),并假设资本回收期(payback period)为3年。

在RD塔的设计中,设计变量主要分为结构变量和操作变量。结构变量包括总塔板数、精馏段和提馏段的塔板数、进料位置及催化剂的分布等。操作变量主要包括回流比和热负荷等,用来保证塔顶、塔底产物纯度满足要求。对设计变量的约束条件描述如下。

(1)应精馏塔的设计参数约束:

$$\varphi(F_A, F_B, N_1, N_{rec}, N_r, R, P, Q_r, Q_c) = 0 \quad (3)$$

式中, F_A 、 F_B 分别为原料A、B的进料位置; N_1 为总理论塔板数; N_{rec} 为精馏段塔板数; N_r 为反应段塔板数; R 为回流比; P 为塔压,kPa; Q_r 为再沸器热负荷,MW; Q_c 为冷凝器热负荷,MW。

式(3)表示了各个设计变量在反应精馏塔中的关系,包括物料平衡、能量平衡、反应速率方程等,用Aspen Plus模拟描述。

(2)对产品摩尔分数的约束:塔顶产物摩尔分数 $X_c \geq X_1$;塔底产物摩尔分数 $X_D \geq X_2$,其中 X_1 、 X_2 分别是塔顶、塔底产物纯度合格指标。

此外,约束条件还包括所选取优化变量的上下限约束。

由于RD过程将反应与分离操作结合于同一个装置内,使得它表现出高度的非线性,此外,设计变量又包含连续和非连续变量,因此,RD过程的优化设计是一个混合整数非线性规划问题。

1.2 基于遗传算法的RD塔综合设计方法

采用遗传算法求解以上优化模型,其中,Aspen Plus模拟的反应精馏过程可以当成“黑箱”模型,嵌入遗传算法中。求解过程如图2所示。

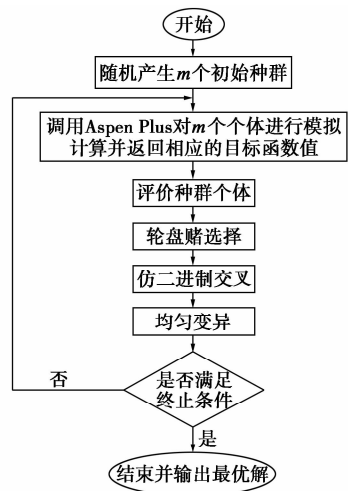


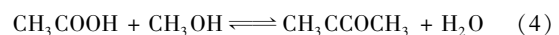
图2 RD塔的综合与设计流程图

本文中遗传优化算法是基于MATLAB软件编译的,MATLAB与Aspen Plus之间的数据传递通过COM技术来实现。COM技术是所有ActiveX组件的基础。Aspen Plus用户界面就是一个ActiveX服务器应用程序,利用接口程序能够将用户对装置模型及其参数的改变传递给Aspen Plus,再把模拟结果与外部应用程序相连接,实现软件集成^[6]。MATLAB则以COM技术为基础,支持ActiveX。利用ActiveX和COM技术,可以实现MATLAB与Aspen Plus之间的数据传递,进而实现优化设计过程的自动运行^[7]。

2 设计实例

2.1 醋酸甲酯的反应精馏设计

以乙酸(HAc)与甲醇(MeOH)反应生成醋酸甲酯(MeAc)和水(H₂O)的反应精馏过程^[8]为例。乙酸和甲醇进料流量均为50 kmol/h,在常压下,以饱和液相状态进入反应精馏塔。得到的产品纯度要求为塔顶MeAc摩尔分数和塔釜H₂O摩尔分数均不低于0.98。反应方程如下:



反应动力学模型为:

$$\gamma = m_{\text{cat}}(k_1 \alpha_{\text{HAc}} \alpha_{\text{MeOH}} - k_{-1} \alpha_{\text{MeAc}} \alpha_{\text{H}_2\text{O}}) \quad (5)$$

式中, γ 为反应速率; m_{cat} 为催化剂质量; k_1 为正向反应速率常数; k_{-1} 为逆向反应速率常数; α_i 为*i*的活度。

$$k_1 = 2.961 \times 10^4 \exp[-49190/(R \times T)] \quad (6)$$

$$k_{-1} = 1.348 \times 10^6 \exp[-69230/(R \times T)] \quad (7)$$

反应精馏塔模型选用Aspen Plus中Radfrac模型,物性方法为UNIQU-HOC。

根据本文中提出的 RD 塔综合设计方法,以年总操作费用 (TAC) 为目标函数,以总塔板数 N_t 、乙酸进料位置 F_1 、乙醇进料位置 F_2 、精馏段板数 N_{rec} 、反应段板数 N_r 、回流比 R 、塔板滞液量 H 为决策变量,以塔顶和塔底产物摩尔分数不低于 0.98 为约束条件进行优化设计。

目标函数的数学表达式为:

$$\min(TAC) = f(N_t, F_1, F_2, N_{rec}, N_r, R, H) \quad (8)$$

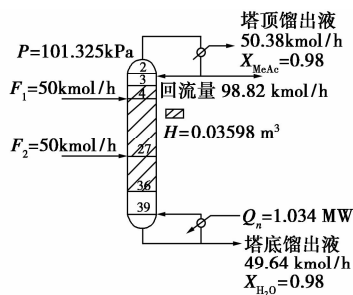
约束条件 $X_{MeAc} \geq 0.98, X_{H_2O} \geq 0.98$ 。

为了确定 7 个决策变量的取值范围,经过 RD 塔单变量分析后确定为表 1 所列。

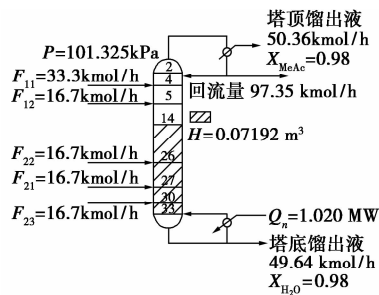
表 1 决策变量变化范围

决策变量	N_t	$F_1/(kmol \cdot h^{-1})$	$F_2/(kmol \cdot h^{-1})$	N_{rec}
变化范围	[25, 45]	[1, N_t]	[1, N_t]	[1, $N_t - 2$]
决策变量	N_r	R	$H/kmol$	
变化范围	[1, $N_t - N_{rec} - 1$]	[0.5, 3.5]	[0.5, 2.5]	

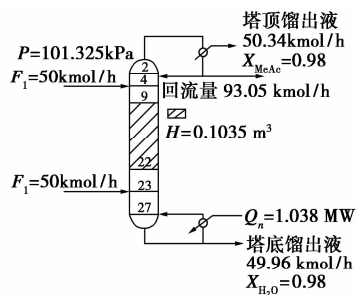
本例遗传算法采用实数编码,经上机反复试验确定种群规模在 100 为宜;采用仿二进制交叉,交叉概率为 0.95;均匀变异,变异概率为 0.05;轮盘赌选择。



(a) 文献[8]模型



(b) 文献[9]模型



(c) 本文中设计模型

图 4 3 个模型的对比

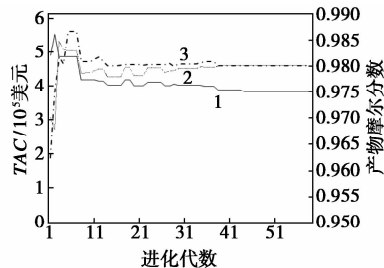
表 2 3 个模型的仿真结果对比

相关参数	文献[8]	文献[9]	本文
TAC/10 ⁵ 美元	4.826	4.005	3.756
X_{MeAc}	0.98	0.98	0.98
X_{H_2O}	0.98	0.98	0.98
Q_r/MW	1.034	1.020	1.038
Q_c/MW	1.237	1.264	1.221

从图 4 中可以看出,该设计方法得到的模型虽然再沸器负荷有所增加,但是总塔板减少了,从而降低了总成本。从表 2 中可以看出,该设计方法所得的模型在保证产物摩尔分数达到要求同时, TAC 较 2 个文献均低。说明该设计方法可以有效地设计出较优的反应精馏塔参数。

2.2 仿真结果及对比

经过 60 代的进化之后,最优解的 TAC、产物摩尔分数与进化代数之间的关系如图 3。



1—最优解;2— X_{MeAc} ;3— X_{H_2O}

图 3 最优解与进化代数的关系

从图 3 中可以看出,前 40 代最优解的产物摩尔分数与 TAC 波动较大,但进入 40 代之后,最优解的 TAC 与产物摩尔分数均逐渐平稳,44 代之后趋于恒定。因此,总进化代数采用 60 代是合理的,可以将 60 代得出的最优解近似为全局最优。

将该优化方法的设计结果和模拟结果与文献 [8-9] 的结果作对比,设计模型如图 4 所示,模拟结果如表 2 所示。

3 结论

基于遗传优化算法提出了一种适用于 RD 塔的综合与设计方法,以醋酸甲酯的反应精馏过程为例,以经济最优为目标函数,通过对总塔板数、进料位置、回流比等决策变量进行搜索,得出 RD 塔的最优结构,并与 2 篇文献所给的结构进行对比。结果表明,采用本方案设计的反应精馏塔能够在保证产物摩尔分数符合要求的前提下,快捷高效地获得经济较优的设计系统。

参考文献

[1] Almeida-Rivera C P, Swinkela P L J, Grievink J. Designing reactive distillation process: present and future [J]. Computers and Chemical Engineering, 2004, 28: 1997 - 2020.

化多级闪蒸过程进行了故障诊断分析。动态模拟的应用十分广泛,对多效蒸发系统进行动态模拟研究具有较大的实际意义。

本文中应用 Aspen Dynamics 对江苏某化工厂含有一定浓度氨气的硫酸铵溶液三效并流蒸发系统进行动态模拟,分析进料过程发生变化时溶液出口浓度的动态响应过程,为多效蒸发系统的生产操作和控制方案制定提供一些指导作用。

1 稳态模型和动态模型的建立

本文中所研究的江苏某化工厂含有一定浓度氨气的硫酸铵蒸发过程为三效并流蒸发,其工艺流程如图 1 所示。在实际工业生产过程中,系统的进料参数不断发生变化影响产品的出口浓度,为了保证产品满足要求、系统能够相对稳定地运行,需要对工艺进行深入分析,结合实际工艺过程,进行动态模拟并制定合理的控制方案。

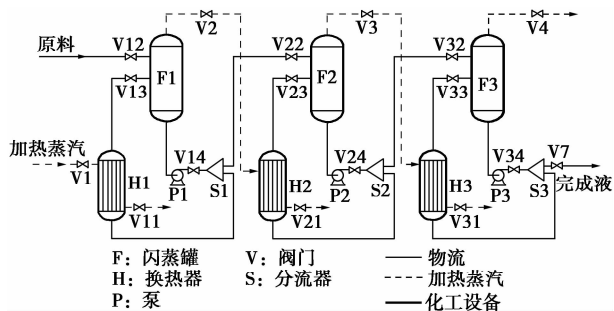


图 1 三效并流工艺流程图

1.1 稳态模型的建立

利用 Aspen Plus 对硫酸铵三效并流蒸发工艺流程进行稳态模拟的目的是为动态模拟提供初始条件。稳态模拟过程中进料流量 $8.2 \text{ m}^3/\text{h}$, 压力 200 kPa , 温度 100°C , 蒸汽压力 300 kPa , 物料组分中 $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ 质量分数 20% , NH_3 质量分数 6.5% 。模拟过程中,选用 ELECNRTL 进行组分定义,换热器设计中热流股出口与冷流股进口温差为 4°C ,各

效分流器的循环质量分率为 0.9 , 各效闪蒸罐的热负荷为零^[20]。

1.2 动态模型的建立

动态模拟是在稳态模拟的基础之上,稳态模拟的结果作为动态模拟的初始条件,经过蒸发器尺寸的设计、压力驱动的检测方可转入动态模拟过程^[21-22]。蒸发器设计采用立式安装、椭圆形封头,规定蒸发器的直径和高分别为 1 m 和 2 m ; 阀门的压降为 10 kPa , 换热器的压降为 10 kPa , 泵的出口压力为 300 kPa , 建立完全压力驱动模型; 导入 Aspen Dynamics 软件中进行动态模拟仿真。带基本控制结构的硫酸铵三效并流蒸发工艺流程如图 2 所示。

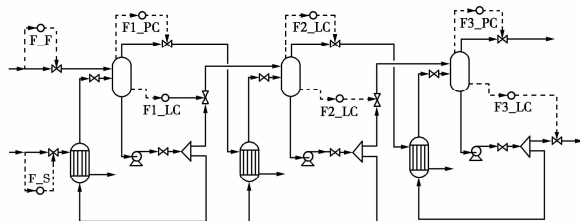


图 2 带基本控制结构的三效并流系统工艺流程图

2 动态模拟分析

2.1 进料流量阶跃变化

图 3 为进料流量发生 $\pm 5\%$ 阶跃变化时系统的动态响应。由于压力调节阀和液位调节阀的响应有滞后性,第一效的压力和液位迅速发生变化,通过压力和液位调节阀的控制,压力约 10 min 恢复稳定,液位约 20 min 恢复稳定。当进料流量发生正向阶跃时,由于加热蒸汽流量恒定,系统提供的总热量不变导致蒸发的水分占进料流量的比例下降,液相出口流量增加,浓度降低。反之,当进料流量发生负向阶跃时,由于加热蒸汽流量恒定,系统提供的总热量不变导致蒸发的水分占进料流量的比例上升,液相

(上接第 188 页)

[2] Buzad G, Doherty M. New tools for the design of kinetically controlled reactive distillation columns for ternary mixtures[J]. Computers and Chemical Engineering, 1995, 19(4): 395-408.

[3] Malone M F, Doherty M F. Reactive distillation[J]. Industrial and Engineering Chemistry Research, 2000, (39): 3953-3957.

[4] 陈根社, 陈新海. 遗传算法的研究与进展[J]. 信息与控制, 1994, 23(4): 215-222.

[5] Luyben W L. Economic and dynamic impact of the use of excess reactant in reactive distillation systems[J]. Industrial and Engineering

Chemistry Research, 2000, 39(8): 2935-2946.

[6] 刘清芝, 胡仰栋. 面向对象的软件集成技术研究[J]. 计算机应用研究, 2004, 21(8): 76-79.

[7] 耿大钊, 陈曦, 邵之江. 基于 COM 技术的 MATLAB 与 Aspen Plus 接口及高级应用[J]. 化工自动化及仪表, 2006, 33(3): 30-34.

[8] Kejin Huang, Haisheng Chen, Liang Zhang. Effective arrangement of an external recycle in reactive distillation columns[J]. Industrial and Engineering Chemistry Research, 2014, 53: 1986-1998.

[9] 李萍. 一种通用的反应蒸馏塔过程强化型综合与设计方法[D]. 北京: 北京化工大学, 2011. ■