

响应面法应用于隔壁塔优化的研究

曹梦习, 赵培*, 张辉, 张秋香
(华东理工大学化工学院, 上海 200237)

摘要: 响应面法是一种考虑多因素的优化方法, 结合 Design Expert 中的 Box-Behnken 设计方法来分析隔壁塔, 并预测优化因素。运用 Aspen Plus 模拟, 简捷计算和严格计算后, 通过灵敏度功能逐个分析操作参数, 在达到相同分离效果时, 结果与传统二塔对比。最后, 以进料位置、侧线采出位置、液相流量和气相流量为 4 因素, 再沸器热负荷和各个产品的摩尔分数为响应值, 进行试验设计分析获得全局最优值。结果表明, 每个因素对响应值的影响均显著, 总热负荷分别降低 23.6%、18.4%, 塔板数减少, 成本降低。相对于隔壁塔单因素的优化, 产品纯度提高, 能耗也进一步降低。

关键词: 响应面法; 隔壁塔; Aspen Plus; 优化

中图分类号: TQ223.1

文献标志码: A

文章编号: 0253-4320(2016)11-0197-04

DOI: 10.16606/j.cnki.issn.0253-4320.2016.11.046

Optimization of the dividing wall columns by response surface methodology

CAO Meng-xi, ZHAO Pei*, ZHANG Hui, ZHANG Qiu-xiang

(College of Chemical Engineering, East China University of Science and Technology, Shanghai 200237, China)

Abstract: Response Surface Methodology is a kind of optimization method considering multiple factors, which is combined with the Box-Behnken design method of Expert Design to analyze the dividing wall columns and predict the optimization factors. The operating parameters are analyzed one by one through the sensitivity function by using Aspen Plus. Under the same separation effect, the obtained results are compared with the traditional two-column distillation processes. By defining feed position, side-draw position, liquid phase flow and vapor flow as the factors, reboiler duty and mole fraction of individual products as response values, the global optimized values can be achieved. The results show that each factor has significant effect on the response value. The total duty is reduced by 23.6% and 18.4%, respectively. The number of the plate and cost are also reduced. Compared with the optimal results of the dividing wall columns via single-factor experiment, the purity of the product is improved and the energy consumption is reduced.

Key words: response surface methodology; dividing wall column; Aspen Plus; optimization

精馏技术广泛用于化工、医药、石油等工业, 技术成熟度高且可靠, 但设备成本和能量消耗也很高, 所以精馏节能技术一直是研究的热门。工业上提出了多种节能措施^[1], 其中, 多塔合并利用热耦原理的新式热耦合精馏塔逐渐受到了人们的关注。比如隔壁塔(dividing wall columns, DWC)^[2], 只用到 1 个再沸器和 1 个冷凝器, 通过 1 个或者多个纵向隔壁塔板就能完成多组分混合物的分离, 减少返混程度, 形成最小混合熵。DWC 有较多的自由度, 同时内部结构设计复杂, 这意味着计算和优化的困难。

有研究人员运用 Aspen 模拟 DWC 分离混合物, 然后进行优化, 常用到的优化方法有单因素分析法^[3]、序列二次规划法^[4]、遗传算法^[5]。也有研究人员采用响应面法^[6]进行 DWC 的能耗经济性设计。与其他方法比较, 响应面法^[7] (response surface methodology, RSM) 是一种研究响应值和独立输入变量之间关系的试验方法, 可以用统计软件计算, 简单

实用且能拟合出全局的函数关系, 是一种非常有效的方法。

1 DWC 的结构

DWC 的结构及等效模型^[2]如图 1 所示。(a)为 DWC 的基本结构。中间的垂直隔板把整个塔分成预分馏塔和主塔。(b)为 DWC 热力学等效模型。原料液从预分馏塔进入, 主塔上半部分进料来自预分馏塔顶的轻组分和部分中间组分, 主塔下半部分进料来自预分馏塔底的重组分和部分中间组分, 进行更彻底地分离。(c)为三塔等效模型。为了方便模拟得到严格计算的初值, 借助于 3 个常规精馏塔的组合。

2 Aspen Plus 计算与优化

2.1 三醇混合物及 DWC 简捷计算模拟

生物柴油清洁, 主要由植物油和乙醇在碱催化

收稿日期: 2016-03-29; 修回日期: 2016-09-16

作者简介: 曹梦习(1991-), 女, 硕士生; 赵培(1963-), 男, 硕士, 副教授, 主要从事实验教学、新型塔板开发研究和工业塔器的设计, 通讯联系人, 021-64252352, c1184682651@163.com。

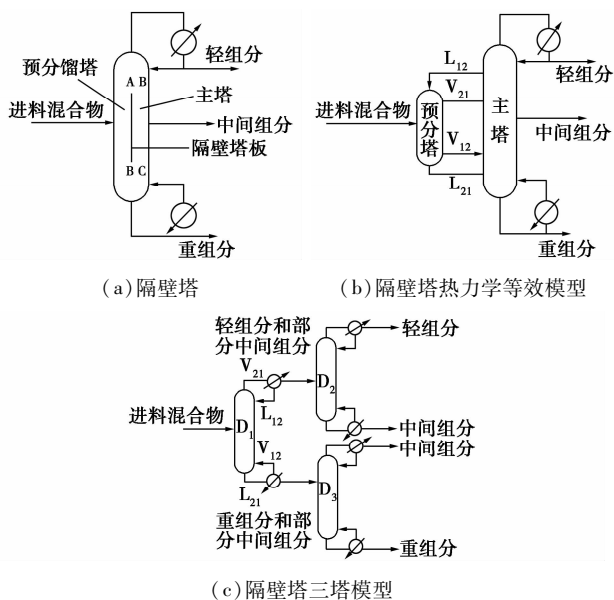


图 1 隔壁塔及其等效模型示意图

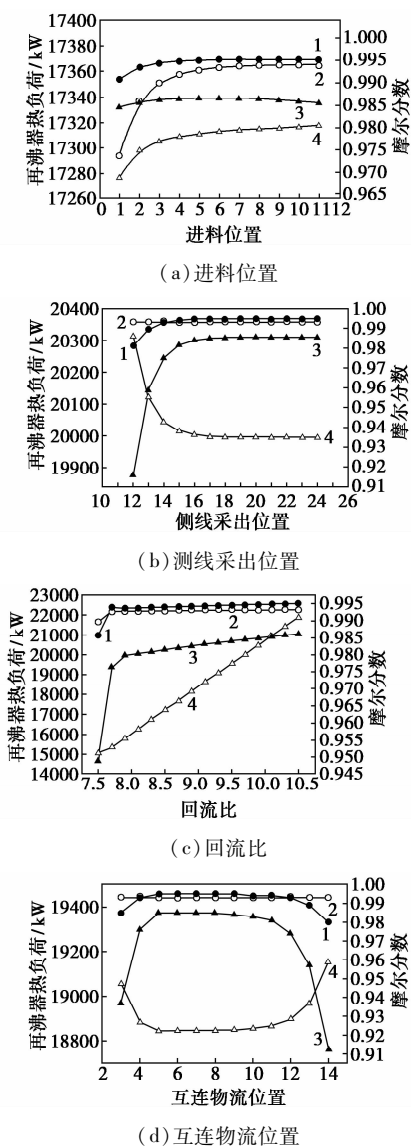
剂条件下反应制得,生产的过程中会有甘油副产物产生,大约占 10%^[8],成为主要的副产物。甘油常用微生物方法制得 1,3-丙二醇(PDO)、2,3-丁二醇(2,3-BD)等醇类。有研究者经过预处理等一系列分离提纯步骤,得到高浓度的混合物,PDO、2,3-BD、甘油比约为 1:5:1^[9-10]。忽略杂质的含量,以分离摩尔比为 1:5:1 的 2,3-BD、PDO、甘油混合物为案例,进料量为 1 000 kmol/h,使用 Aspen Plus V8.4 模拟。由于混合物两两之间不发生共沸,且为低碳醇,属于极性非电解质,故物性方法采用 NRTL。DWC 的简捷模拟使用三塔等效模型,不断进行模拟调试,得到的计算结果如表 1 所示。

表 1 简捷计算结果

主要参数	D ₁	D ₂	D ₃
回流比	0.051	1.92	0.091
理论板数	26	17	31
进料位置	21	10	19
冷凝器负荷/kW	7848.9	6860.8	8854.0
再沸器负荷/kW	2254.0	6932.6	9252.5

2.2 DWC 严格计算模拟与优化

由表 1 得到的结果作为运算初值,泡点进料,主塔理论板数 48,侧线采出为第 17 块板,回流比 1.92,预分馏塔板数 26,进料位置为第 21 块板,互连物流 L₁₂ 为 38 kmol/h, V₂₁ 为 820 kmol/h。用 Multifrac 模块进行严格计算,运用灵敏度功能,控制单个因素为变量进行分析。使用 Origin 8 作图,结果如图 2 所示。



1—1,3-丙二醇;2—甘油;3—再沸器热负荷;4—2,3-丁二醇

图 2 单因素变量对再沸器热负荷和各产品摩尔分数的影响

可以看出,再沸器热负荷与回流比存在线性关系,进料位置和侧线采出位置是非线性关系。综合分析后确定:主塔理论板数为 40,预分塔理论板数为 16,预分馏塔进料位置为第 7 块板,主塔侧线采出位置为第 18 块板,回流比为 9.2,互连物流 L₁₂ 为 28 kmol/h, V₂₁ 为 825 kmol/h。运行后得到结果为:PDO、2,3-BD 和甘油的摩尔分数分别为 99.5%、98.5%、99.4%,再沸器热负荷为 18 859.9 kW。

2.3 DWC 与传统二塔单因素结果对比

工业上在分离多组分时,因各组分间的挥发度不同,常用多塔精馏进行操作。对 3 组分混合溶液精馏时,需要搭建 2 个塔才能获得 3 个高纯度的产品。传统二塔的分离模拟流程图如图 3 所示。

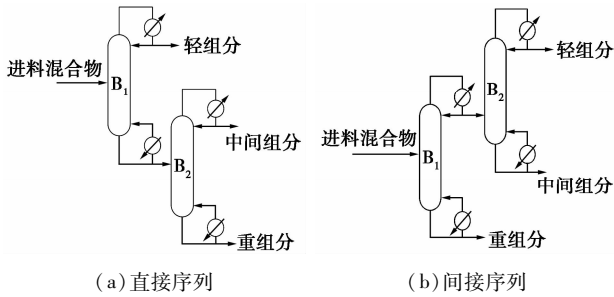


图 3 传统多塔串联流程示意图

简捷、严格计算后,在满足各个物质分离要求的前提下,运用灵敏度分析功能优化,结果如表 2 所示。

表 2 传统流程与 DWC 流程重要参数对比

参数	直接序列		间接序列	
	B ₁	B ₂	B ₁	B ₂
理论板数	22	27	30	19
进料位置	9	15	17	11
回流比	7.200	0.012	0.065	4.090
操作压力/kPa	3	3	3	3
冷凝器负荷/kW	19777.2	13384.0	16677.5	12029.4
再沸器负荷/kW	14275.7	13776.1	11536.4	12133.2

DWC 和传统二塔的结果对比发现,DWC 所需理论板数为 40,比传统二塔的理论板数减少 9 块,加之少了 1 个再沸器和 1 个冷凝器,大大减少了设备的投资费用;直接序列的总热负荷为 55 953.5 kW,间接序列的总热负荷为 52 376.5 kW,而 DWC 的总热负荷仅为 42 856.6 kW。

3 响应面法优化

3.1 响应面法

响应面法^[6-7,11]是数学和统计学方法相结合的产物,是包含一次项、二次项和交互作用项的一种数学模型,建模和分析受多个因素影响的响应值,在生物、医学和食品等方面有着广泛的应用。

响应函数为:

$$y = f(x_1, x_2, x_3, \dots, x_k) + \varepsilon$$

ε 表示响应值 y 的观测误差或噪音。一般响应值和因素之间的关系是未知的,因此使用 RSM 设计,首先是找到响应值 y 和因素之间一个合适的函数关系式。响应面法使用的广义二阶多项式模型可表示为:

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i < j} \beta_{ij} x_i x_j + \varepsilon$$

采用 Design Expert 软件进行试验设计,BBD 是最常用的响应面设计方法之一,通过 3 水平设计产生比较少且合理的试验次数,可以评估因素的非线性影响,是一种高效的响应面设计^[11]。

3.2 响应面法优化

综合考虑分离要求、热负荷大小和设备费用,选择合适的因素范围,用软件进行试验设计。以单因素分析结果作为响应面法优化的参照值,理论塔和预分馏塔板数不变, q 值和回流比不变。模拟的试验次数为 29 次,各因素水平设计表如表 3 所示。

表 3 各因素水平设计表

因素	因素水平		
	-1	0	1
进料位置	4	6	8
侧线采出位置	16	18	20
液相流量 $L_{12}/(\text{kmol} \cdot \text{h}^{-1})$	18	28	38
汽相流量 $V_{21}/(\text{kmol} \cdot \text{h}^{-1})$	815	845	875

数据分析获得相应的数据、图形和函数关系式,以 PDO 摩尔分数的响应分析为例说明。表 4 为 PDO 摩尔分数的响应分析, P 值中如果 $P \leq 0.05$,表明模型对 y 的影响显著;如果 $P < 0.0001$,表明模型对 y 的影响非常显著。查 $\alpha = 0.05$ 的 F -分布表,得 $\lambda = 2.96$, $F > \lambda$,可知模型是有效的,可信度较高。

表 4 PDO 摩尔分数的响应分析

方差来源	平方和	自由度	均方	F 值	P 值
模型	2.9×10^{-5}	14	2.07×10^{-6}	61.07	<0.0001
A-进料位置	4.5×10^{-6}	1	4.5×10^{-6}	132.55	<0.0001
B-侧线采出位置	1.25×10^{-7}	1	1.25×10^{-7}	3.68	0.0872
C-液相流量	1.25×10^{-7}	1	1.25×10^{-7}	3.68	0.0872
D-汽相流量	3.19×10^{-6}	1	3.19×10^{-6}	93.88	<0.0001
AB	2.5×10^{-7}	1	2.5×10^{-7}	7.36	0.0239
AC	2.5×10^{-7}	1	2.5×10^{-7}	7.36	0.0239
AD	1.00×10^{-7}	1	1.00×10^{-7}	2.95	0.1203
BC	0	1	0	0	1.0000
BD	2.25×10^{-7}	1	2.25×10^{-7}	6.63	0.0300
CD	2.5×10^{-8}	1	2.5×10^{-8}	0.74	0.4131
A ²	1.09×10^{-6}	1	1.09×10^{-6}	31.98	0.0003
B ²	4.24×10^{-7}	1	4.24×10^{-7}	61.07	<0.0001
C ²	3.32×10^{-6}	1	3.32×10^{-6}	132.55	<0.0001
D ²	1.05×10^{-6}	1	1.05×10^{-6}	3.68	0.0872

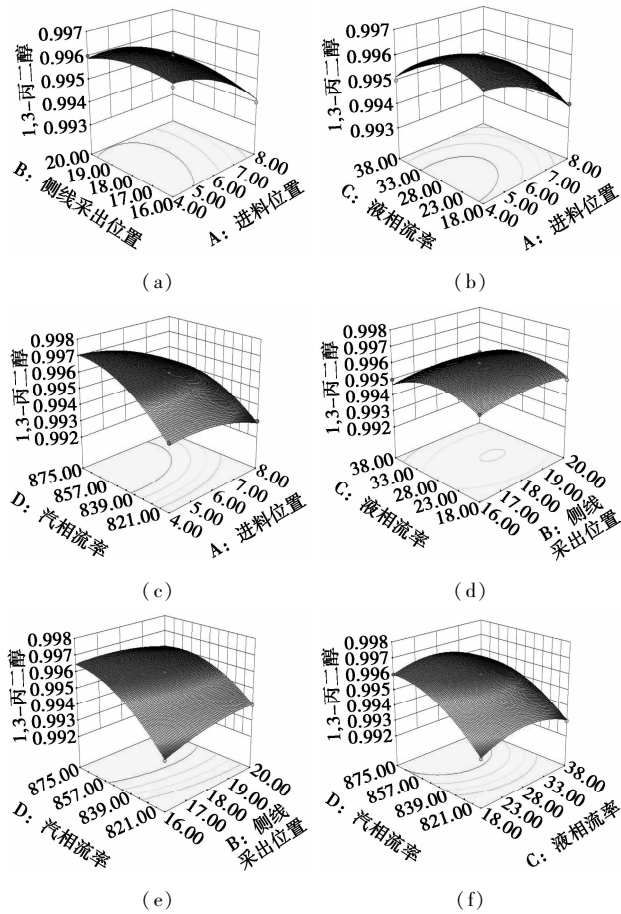


图 4 PDO 摩尔分数交互作用响应面图

图 4 为 PDO 摩尔分数交互作用响应面图。在模型中,因素 A、D 和 A、B、C 的二次项和 AB、AC、BD 的交互项对 y 的影响显著。其他值对响应值均不够显著,但差别不多。 F 模型的相关系数 $R^2 = 0.9896$,校正系数 $R_{Adj} = 0.9734$,说明模型可以用 97.34% 的试验所得结果来解释,变异系数 $CV = 0.019\%$,说明模型的可靠性高。表 5 为各响应值主要的响应分析结果。

表 5 各响应值主要的响应分析结果

响应值	相关系数	校正系数	变异系数 $CV/\%$
再沸器热负荷	0.9997	0.9992	4.966×10^{-3}
1,3-丙二醇	0.9896	0.9734	0.019
2,3-丁二醇	0.9996	0.9989	0.022
甘油	0.9901	0.9747	0.043

3.3 响应面法预测优化

最后进行响应面法的预测优化,结果是:进料位置为第 5 块板,侧线采出位置为第 19 块板,液相流量为 32 kmol/h,气相流量为 860 kmol/h。运行后得到结果:PDO、2,3-BD 和甘油的摩尔分数分别为

99.7%、99.6%、99.3%,相比较 99.5%、98.5%、99.4% 的分离程度,纯度增加;再沸器热负荷为 18 793.4 kW,总负荷为 42 722.5 kW,相对比传统二塔,总热负荷分别降低 23.6%、18.4%;而且与单因素分析得到的结果相比产品的纯度更高,能耗也降低了。

4 结论

RSM 是一种建立模型、评估不同因素的影响和确定响应最优条件的设计试验方法。采用合理的试验设计得到响应值与因素的函数关系,优化多变量问题。Aspen Plus 模拟 DWC 分离三元混合物,针对 DWC 的节能效果因自由度多而设计困难的问题,考虑因素间的相互作用,并参照单因素分析结果选择合适的因素范围,得到相应的优化结果,发现能耗降低约 20%,且各个物质的摩尔分数均达到 99.3% 以上。

参考文献

- [1] 龚超. 完全热耦合精馏塔的设计与模拟研究[D]. 天津:天津大学,2012.
- [2] Dejanovic I, Matijašević Lj, Halvorsen I J. Designing four-product dividing wall columns for separation of a multicomponent aromatics mixture[J]. Chemical Engineering Research and Design, 2011, 89: 1155-1167.
- [3] 汪丹峰. 分壁式精馏塔的模拟和实验研究[D]. 上海:华东理工大学,2011.
- [4] Kissa A A, Suszwalak. Efficient bioethanol dehydration in azeotropic and extractive dividing-wall columns[J]. Procedia Engineering, 2012, (42): 620-626.
- [5] 李军,王纯正,马占华. 基于 Aspen Plus 和 NSGA-II 的隔壁塔多目标优化研究[J]. 高校化学工程学报, 2015, 29(2): 400-406.
- [6] Long N V D, Lee M. Optimal retrofit of a side stream column to a dividing wall column for energy efficiency maximization[J]. Chemical Engineering Research and Design, 2013, 91: 2291-2298.
- [7] Long N V D, Minh L Q, Nhlen L C. A novel self-heat recuperative dividing wall column to maximize energy efficiency and column throughput in retrofitting and debottlenecking of a side stream column[J]. Applied Energy, 2015, 159: 28-38.
- [8] Rossi D M, Costa J B, Souza E A. Bioconversion of residual glycerol from biodiesel synthesis into 1,3-propanediol and ethanol by isolated bacteria from environmental consortia[J]. Renewable Energy, 2012, 39: 223-227.
- [9] Metsoviti M, Paraskevaïdia K, Koutinasa A. Production of 1,3-propanediol, 2,3-butanediol and ethanol by a newly isolated Klebsiella oxytoca strain growing on biodiesel-derived glycerol based media[J]. Process Biochemistry, 2012, 47: 1872-1882.
- [10] 赵培,张辉,张秋香. 隔壁塔提纯甘油发酵液中 1,3-丙二醇的模拟研究[J]. 现代化工, 2016, 36(2): 161-164.
- [11] 刘振学,王力. 实验设计与数据处理[M]. 北京:化学工业出版社, 2015. ■