

文章编号: 1000-5013(2010)01-0065-04

二甲醚精制分离序列的动态规划

韩媛媛^{1,2}, 应卫勇², 房鼎业²

(1. 华侨大学 化工学院, 福建 泉州 362021;

2. 华东理工大学 化学工程联合国家重点实验室, 上海 200237)

摘要: 针对合成气一步法合成二甲醚的精馏精制过程, 研究分离二甲醚-二氧化碳-甲醇-水混合物的顺序问题. 根据精馏分离过程特点, 将二甲醚混合物精馏精制分离过程分成多阶段的决策过程, 建立相应的分离工艺方案动态规划模型. 在模型求解过程中, 提出年操作费用最小准则, 并利用动态规划算法计算出不同阶段、不同决策下的目标函数最优解, 得到最优的分离序列. 结合研究体系的特点, 将动态规划结果加以改进, 给出二甲醚精馏精制最优分离方案.

关键词: 动态规划; 分离序列; 二甲醚; 精馏

中图分类号: TQ 028.1⁺3; TQ 223.2⁺4

文献标识码: A

二甲醚(DME)作为柴油的可替代清洁燃料, 受到越来越多的关注^[1]. 以煤基合成气一步法合成二甲醚的工艺路线是可行的, 符合中国国情的需要, 但相比于甲醇脱水制备二甲醚而言, 合成气一步法制备二甲醚的分离路线相对复杂. 为了得到纯度较高的二甲醚产品, 吸收和精馏操作更多地被用于精制二甲醚的过程中^[2-4]. 精馏过程在实际投资费用和操作费用上占有很大比重, 所以对分离序列综合问题的研究就具有很重要的经济意义. 精馏分离序列研究是从单一进料, 产物为纯组分的清晰分割序列合成^[5]到非清晰精馏序列合成^[6-7], 国内学者对此进行了相关的研究工作^[8-9]. 文[10-12]从理论和方法上对精馏分离序列作了深入的探索. 实际工程中, 寻找最优分离序列常常采用直观推断、渐进调优和最优化等经典方法^[13]. 1957年, 美国数学家 Bellman 提出的动态规划法, 是解决一个多决策过程的最优化方法之一, 被广泛地用于各种领域之中. 本文采用动态规划算法, 对二甲醚精馏精制过程进行优化规划.

1 二甲醚精馏精制过程动态规划模型

1.1 模型原理

动态规划是将要解决的问题划分成多个过程, 而动态规划的过程就是多段决策的过程. 在多段过程的各阶段, 系统状态面临多种变换, 每个阶段都会出现变换选择的问题. 也就是说, 系统除了有状态变量之外, 还存在控制变量, 由决策者根据系统状态确定.

(1) 动态优化描述方程为

$$\text{opt } f = [f_k(s_k, x_k) + f_K(s_K)].$$

其中: k 为整数, 表示阶段, K 为终端阶段, s_k 为状态, x_k 为决策变量, f 为整体目标函数.

(2) 状态转移方程为

$$s_{k+1} = u(s_k, x_k).$$

即 $k+1$ 个阶段的状态 s_{k+1} 取决于第 k 个阶段的状态 s_k 与决策变量 x_k . 状态具有无后效性, 即当前状态未来的过程与当前状态有关, 而与形成当前状态的过程无关.

收稿日期: 2008-08-21

通信作者: 应卫勇(1957-), 男, 教授, 博士生导师, 主要从事化学与催化反应工程、化工过程模拟与优化的研究. E-mail: wying@ecust.edu.cn.

基金项目: 国家“十一五”科技支撑计划项目(2006BAE02B02); 国家重点基础研究发展(973)计划项目(2005CB221205)

1.2 实际问题动态规划模型

按照上述动态规划原理和方法,对具体研究体系进行规划.首先,作以下3点假设:(1)二甲醚精制过程的分离只采用精馏作为分离方法;(2)各精馏塔均为简单塔;(3)不考虑热集成.

进行精制的物料中,主要含有二氧化碳、二甲醚、甲醇及水4种组分^[14].根据动态规划原理,这4组分精馏序列的独立分离单元数为10,组分的排列按照挥发度递减的顺序排列:



二甲醚精制分离序列规划问题可以视为一个三阶段决策过程,ABCD分别对应二氧化碳、二甲醚、甲醇和水,混合物为初始状态,终止状态为A,B,C,D纯净物.由起点到终点的决策序列如图1所示.

将体系的分离过程分为若干互相联系的子过程,每一个子过程称为阶段,用变量 k 表示.以分离序列年度费用 C 为该规划问题的目标函数,按照动态规划的递推,其关系式为

$$f_k(s_k) = \text{opt}\{C_k(s_k, x_k) + f_{k+1}(s_{k+1})\}.$$

上式中:初始条件 $f_{k+1}(s_{k+1}) = 0$,使得目标函数最小值的即为最优决策的分离序列.

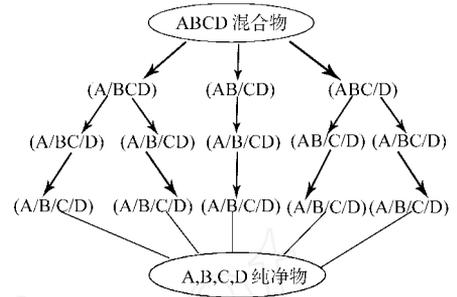


图1 二甲醚体系精馏分离多阶段决策
Fig.1 Multistage decision of separation for pure DME

2 计算过程和结果

2.1 成本费用计算

以进料量为 $900 \text{ kmol} \cdot \text{h}^{-1}$, A,B,C,D组分的摩尔分数分别为0.2337%, 2.8160%, 0.7624%, 96.1800%的物料为研究对象,关键组分的回收率不低于98%,项目寿命按10a计.

虽然费用成本与各国经济状况密切相关,在不同的时期,费用也会不同,但是按照一定标准计算的费用,不会因此而改变最优分离序列结果.分离成本的主要计算公式参照文[15].其中,每一个独立分离单元理论塔板数计算采用简捷算法^[16],分别按如下6个部分计算.

(1) 塔体尺寸 D_c 的计算. 即

$$D_c = [(4/V)D(R+1)(22.2)(T^V/273)(1/P)(1/3600)]^{0.5}.$$

(2) 塔设备费包含塔体费 (C_{EC}) 和塔板费 (C_T), 有

$$C_{EC} = 4.34[762D_c(H_c/12.2)]^{0.68}, \quad C_T = 70N(D_c/1.22)^{1.9}.$$

(3) 换热器设备费 C_{HE} 的计算, 有

$$C_{HE} = 3.39[9000(A/92.1)]^{0.65}.$$

(4) 操作费 C_E 的计算, 有

$$C_E = 8500(C_u^c Q_c + C_u^h Q_b).$$

其中: $C_u^c = 1.0507 - 0.03134(T - 273)$, $223 < T < 305$; $C_u^h = -0.02871 + 0.002392(T - 273)$, $305 < T < 573$.

表1 分离序列费用

Tab.1 Cost for the separation sequence

组群	分离决策	$C_{\min}/\text{万元} \cdot \text{a}^{-1}$	$C_{\text{tot}}/\text{万元} \cdot \text{a}^{-1}$
(AB)	A/B, $C_{2,1}$	2.457	2.457
(BC)	B/C, $C_{2,2}$	2.560	2.560
(CD)	C/D, $C_{2,3}$	5.229	5.229
(ABC)	A/BC, $C_{3,1}$	3.113	5.673
	AB/C, $C_{3,2}$	2.725	5.182
(BCD)	B/CD, $C_{3,3}$	7.443	12.672
	BC/D, $C_{3,4}$	8.844	11.404
(ABCD)	A/BCD, $C_{4,1}$	3.946	15.350
	AB/CD, $C_{4,2}$	5.819	13.505
	ABC/D, $C_{4,3}$	8.642	13.824

(5) 仪表费 C_I 按绝对估计值4000计;

维修费 C_0 按固定投资的2%计.

(6) 单塔分离成本 C 的计算, 有

$$C = C_0 + C_E + (C_{EC} + C_T + C_{HE} + C_I)/10.$$

按上述计算公式计算,可以得到不同组团在不同分离决策下所需成本费用,如表1所示.表1中: C_{\min} , C_{tot} 分别为分离决策的最小费用和总费用.

2.2 规划模型计算

按照决策序列将项目分为3个阶段, $k =$

3. 规划的问题是在相应的约束条件下, 确定

各决策变量 x_k , 使系统整体的年花费最小, 即求 $\min f_1(s_1)$. 在不同组团下, 各决策变量 x_k 的分离方式费用函数 $C_k(s_k, x_k)$ 为已知, 如表 1 数据. 依照上述动态规划递推关系式对目标函数进行求解:

(1) 对第 3 个决策过程, 由递推公式有

$$f_3(s_3) = \{ \min C_3(s_3, x_3) + f_4(s_4) \}, \quad f_4(s_4) = 0.$$

对不同的决策, 分别有

$$\begin{aligned} f_3(s_3) &= C_3(s_3, x_{3,1}) = C_{21} = 2.457, \\ f_3(s_3) &= C_3(s_3, x_{3,2}) = C_{22} = 2.560, \\ f_3(s_3) &= C_3(s_3, x_{3,3}) = C_{23} = 5.229, \\ f_3(s_3) &= C_3(s_3, x_{3,4}) = C_{22} = 2.560, \\ f_3(s_3) &= C_3(s_3, x_{3,5}) = C_{23} = 5.229. \end{aligned}$$

(2) 同理, 对于第 2 个阶段决策过程, 有

$$f_2(s_2) = \min\{ C_2(s_2, x_2) + f_3(s_3) \}.$$

对不同的决策, 分别有

$$\begin{aligned} f_2(s_2) &= \min\{ C_{2,1} + C_{3,2}; C_{2,2} + C_{3,1} \} = C_{2,1} + C_{3,2} = 5.182, \\ f_2(s_2) &= \min\{ C_{2,1} + C_{2,3} \} = 7.686, \\ f_2(s_2) &= \min\{ C_{2,3} + C_{3,3}; C_{2,2} + C_{3,4} \} = C_{2,2} + C_{3,4} = 11.404. \end{aligned}$$

(3) 对于第 1 个阶段决策过程, 有

$$f_1(s_1) = \{ \min C_1(s_1, x_1) + f_2(s_2) \}.$$

对不同的决策, 分别有

$$\begin{aligned} f_1(s_1) &= C_{4,1} + \min(f_2(s_2)) = C_{4,1} + C_{2,2} + C_{3,4} = 15.350, \\ f_1(s_1) &= C_{4,2} + \min(f_2(s_2)) = C_{4,2} + C_{2,1} + C_{2,3} = 13.505, \\ f_1(s_1) &= C_{4,3} + \min(f_2(s_2)) = C_{4,3} + C_{2,1} + C_{3,2} = 13.824. \end{aligned}$$

因此, 第 1 阶段决策过程最优函数值为 13.505 万元 $\cdot a^{-1}$. 将各阶段最优值函数反演, 可以得到整个体系最优策略, 即最优分离序列, 如图 2 所示. 以组分二甲醚为分割点, 甲醇和水作为重组分, 从塔底引出作进一步处理, 而二氧化碳和二甲醚作为轻组分, 从塔上部引出作进一步处理.

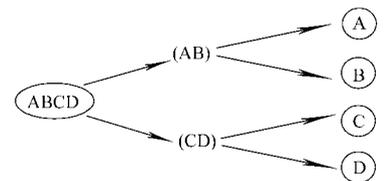


图 2 最优分离序列

Fig. 2 Optimal separation sequence

从以上结果可以看出, 最优分割点在二甲醚组分. 二氧化碳沸点较低, 二甲醚通常状态下蒸汽压不是很高^[17], 在加压情况下容易液化. 在此最优分离序列的基础上, 结合体系性质对上述分离序列做局部修改, 提出改进的分离序列, 省去了一个精馏塔. 二氧化碳作为不凝气从塔顶排除, 二甲醚从塔上部适当位置引出, 甲醇和水从塔底引出作进一步处理.

实验研究的结果^[18]证明, 改进的分离序列具有合理性和可行性, 动态规划算法得出的最优分离序列有指导意义.

3 结束语

从以上实际例证可以看出, 动态规划是解决分序列决策问题的最有效方法之一. 同样的方法和思路可以应用到化工精馏分序的其他研究体系上, 在确定决策问题后, 快速地确定匹配优化问题, 对实际问题的解决提供可行和有效的决策过程.

参考文献:

[1] ZHANG Liang, ZHEN Huang. Life cycle study of coal-based dimethyl ether as vehicle fuel for urban bus in China [J]. Energy, 2007, 32(10): 1896-1904.
 [2] GUENTER K, KARL B, RAINER H, et al. Direct prepn of di-methyl ether from synthesis gas with controllable purity, useful for aerosols or for domestic and industrial heating: DE, 4222655 [P]. 1994.
 [3] BODIL V, FINN J, BOEGILD H J. Preparation of fuel grade dimethyl ether: WO, 9623755 [P]. 1996-08-08.

- [4] 唐宏青,房鼎业,唐锦文.合成气一步法制二甲醚的分离方法:中国,1548411A[P].2004-11-24.
- [5] ARTHUR W. The synthesis of distillation-based separation systems[J]. Comput Chem Eng,1985,9(5):421-429.
- [6] MURA KI M, KATAOKA K, HA YA KAWA T. Evolution synthesis of a multicomponent multiproduct separation process[J]. Chemical engineering science,1986,41(7):1843-1851.
- [7] MURA KI M, HA YA KAWA T. Separation process synthesis for multicomponent product[J]. J Chem Eng Japan, 1984,17(5):533-538.
- [8] 李瑞钱,富才,李力,等.动态规划问题研究[J].系统工程理论与实践,2007,27(8):56-64.
- [9] WANG Tao, LU Xian-liang, HOU Meng-shu. Novel algorithm for distributed replicas management based on dynamic programming[J]. 系统过程与电子技术,2006,17(3):669-672.
- [10] 董宏光,王涛,秦立民,等.精馏分离序列综合邻域结构的研究[J].华东理工大学学报:自然科学版,2004,30(1):29-33.
- [11] CHEN Li, GAO Zhi-hui, DU Jian, et al. A simultaneous optimization method for the structure and composition differences of a mass exchange network[J]. Chinese Journal of Chemical Engineering,2007,15(2):254-261.
- [12] 董宏光,王涛,秦立民,等.应用遗传算法实现精馏分离序列优化综合[J].化工进展,2004,23(2):205-209.
- [13] NISHIDA N,STEPHANOPOULOS G,WESTERBERG A W. A review of process synthesis[J]. AIChEJ,1981,27(3):321-351.
- [14] 唐宏青,房鼎业.合成气一步法制二甲醚基本工艺包设计简介[J].大氮肥,2004,27(2):98-99.
- [15] RATHORE R N S,VAN WORMER K A,POWERS G J. Synthesis strategies for multicomponent separation system with energy integration[J]. AIChEJ,1974,20(3)491-502.
- [16] NPVA K Z,KRAVANJA Z,GROSSMANN I E. Simultaneous synthesis of distillation sequence in overall process schemes using an improved approach[J]. Comput Chem Eng,1996,20(12):1425-1440.
- [17] REID R C,PRAUSNITZ J M,SHERWOOD T K. The properties of gases and liquids[M]. New York: Mc Graw-Hill,1977:226-257,184-193.
- [18] 韩媛媛,张海涛,应卫勇,等.二甲醚精馏塔实验研究与模拟计算[J].化工学报,2008,59(5):1184-1189.

Separation Sequence for Dimethyl Ether Refining Based on Dynamic Programming

HAN Yuan-yuan^{1,2}, YING Wei-yong², FANG Ding-ye¹

(1. College of Chemical Engineering, Huaqiao University, Quanzhou 362021, China;

2. State Key Laboratory of Chemical Engineering, East China University of Science and Technology, Shanghai 200237, China)

Abstract: It is economical for practical investment and operating cost to study on the separation sequences for dimethyl ether-CO₂-methanol-water separation. The dynamic programming model for the separation project is developed while the research system is separated into multistage decision process according to distillation separation features. The minimum annual cost of separation sequence is as the object function, and the optimum separation sequence is obtained through the dynamic programming algorithm. By modifying the programming result, the probable separation sequence for purification of dimethyl ether is given for reference.

Keywords: dynamic programming; separation sequence; dimethyl ether; distillation

(责任编辑:黄仲一 英文审校:陈国华)