

液氮洗工艺的多目标遗传算法优化

张旭, 颜立伟, 李云, 张早校

(西安交通大学能源与动力工程学院, 710049, 西安)

摘要: 为了优化大化肥中的液氮洗关键流程以提高能量效率、控制 CO_2 排放, 在使用 Aspen Plus 软件对某低温液氮洗工艺进行模拟分析的基础上, 结合多目标遗传算法和二次规划法(MOGA-QP)来解决局部极值和大规模优化问题. 根据超结构方法, 构建了液氮洗工艺流程总结构, 即在原流程中加入了一个减压阀和一个分离器, 由此可以增补 29.546 kJ/kg 冷量, 使得液氮洗涤塔出口净化气中的 CO 体积分数为 0.55×10^{-6} . 利用 MOGA-QP 求解了超结构, 即在进化过程中用二次规划法来模拟流程表单的各个子模块, 在最终收敛的环节用二次规划法求解子问题, 从而对遗传算法产生的 Pareto 解做进一步的精细优化. 实际应用显示: 在满足工艺指标的前提下, 优化后的液氮入口流量减至 0.1312 kmol/s , 出口 CO 体积分数降至 0.25×10^{-6} , 液氮入口流量减少了 1.7% , 炯损失减少了 15.7% , 表明改进流程更佳, MOGA-QP 算法有效.

关键词: 液氮洗; 模拟分析; 多目标遗传算法; 过程优化

中图分类号: TQ441.5 **文献标志码:** A **文章编号:** 0253-987X(2011)05-0114-05

Multi-Objective Genetic Algorithm Optimization for Liquid Nitrogen Wash Process

ZHANG Xu, YAN Liwei, LI Yun, ZHANG Zaoxiao

(School of Energy and Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

Abstract: A multi-objective genetic algorithm with quadratic programming (MOGA-QP) was proposed to optimize the liquid-nitrogen washing process in large fertilizer plants based on the simulation by using Aspen Plus software. According to the superstructure method, the flowsheet of liquid-nitrogen washing process was constructed by adding a throttle valve and a separator. The proposed algorithm MOGA-QP was employed to solve the superstructure of the liquid-nitrogen washing process. The results of the case study show that the optimization of the liquid-nitrogen washing process reduced the inlet flow rate of liquid-nitrogen and the CO volume fraction at the exit to 0.1312 kmol/s and 0.25×10^{-6} , respectively. Moreover, the inlet flow rate of liquid nitrogen and the exergy loss decreased by 1.7% and 15.7% , respectively. It appears that the improved process is much better and the MOGA-QP algorithm is effective.

Keywords: liquid-nitrogen washing process; simulation analysis; multi-objective genetic algorithm; process optimization

自能源危机以来, 节能技术倍受重视, 其实质是充分利用能量, 提供更多的有效能. 随着人们对温室效应的日益关注, CO_2 减排技术逐渐得到了广泛研究^[1]. 大型合成氨生产是能量密集型产业, 对其进行

过程集成可以显著减少燃料燃烧, 降低能量消耗, 提高能量利用, 减少 CO_2 排放.

本文针对低温下的液氮洗进行了模拟和过程优化研究. 自 Linhoff 夹点技术和 Grossman 数学规划

法提出以来,过程优化研究^[2]受到了广泛关注.液氮洗工艺复杂,优化变量较多,若采用传统方法,则计算量较大,并且容易陷入局部极小,而采用遗传算法可以解决以上问题.本文采用传统方法进行优化,用多目标遗传算法精细优化.经对比发现,结合了多目标遗传算法(MOGA)和二次规划法(QP)的MOGA-QP方法在流程优化中取得了良好的效果.

1 多目标遗传算法

1.1 遗传算法

目前,多目标遗传算法在化工领域的应用主要体现在过程优化和反应器优化等方面. Ray 等人^[3]运用 NSGA-II 算法对工业苯乙烯反应器进行了多目标优化,运用 NSGA 对乙酸甲酯水解的模拟移动床进行了多目标优化^[4],并从中获得了良好的 Pareto 解集. Silva 等人^[5]通过在多目标遗传算法中引入新的 Pareto 解集过滤算子,成功地对间歇自由基苯乙烯聚合过程的单体转化率和产品的杂质残留进行了优化.

由于化工过程的复杂性,单纯自行编程模拟众多化工单元模块的工作量极其浩大,所以许多学者开始着手将高级语言工具与化工流程模拟软件(Aspen、Pro-II 等)结合使用,充分利用现有模块,从而缩短了编程时间. Tarafder 等人^[6]运用 NSGA-II、结合过程模拟软件 Hysys 对工业苯乙烯生产工艺流程进行了多目标优化,从中得到了均匀的 Pareto 集.

1.2 MOGA-QP 方法

根据超结构方法构建了包括各种可能改造的液氮洗工艺流程的总结构,同一局部的多种选择方案可以并联接入总结构.这种超结构需要考虑工艺约束、时间约束和环境约束^[7]等条件.本文采用 MOGA-QP 方法求解了超结构,结合 Aspen Plus 软件对液氮洗工艺进行了优化分析.在进化过程中利用 QP 来模拟流程表单的各个子模块,在最终收敛环节再利用 QP 求解子问题,从而对遗传算法(GA)产生的 Pareto 解做进一步的精细优化,其中目标函数采用了过程焓损失和液氮洗涤塔温差,对应的算法描述如图 1 所示.

实际的液氮洗工艺存在着较多的复杂约束,使得可行域是一个非凸集,通常采用传统算法逼近或者采用分割策略进行求解,但算法过于复杂. GA 可以通过交叉变异立即检验子代取值,淘汰可行域之外的子代,从而消除非凸影响.该算法流程的混合

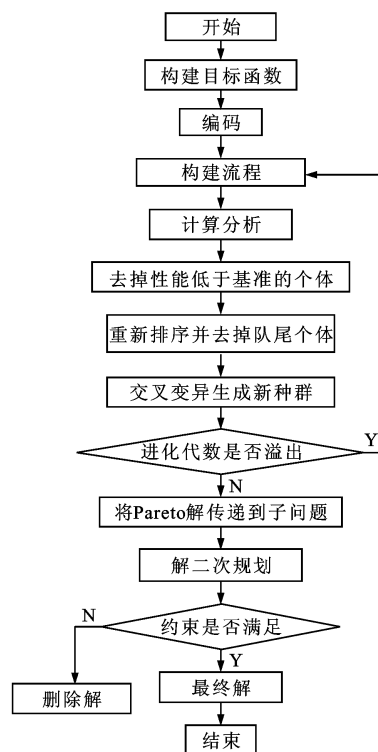


图 1 MOGA-QP 方法流程

整数非线性规划模型(MINLP)具有 3 个主变量,若利用传统方法求解将是一个巨大的挑战. GA 启发式方法能够在可以接受的计算时间内取得一个较优的 Pareto 解集,尽管无法阐述所得解与最优解的相似度,但实际计算获得了满意的结果.

2 液氮洗主要流程模拟

2.1 液氮洗流程

在液氮洗工艺中,来自低温甲醇洗工段的原料气首先通过分子筛去除杂质,再经换热器逆流换热后进入液氮洗涤塔 C1 底部.塔中气体 CO、Ar、CH₄ 等杂质被液氮冷凝、溶解,精制气体由塔顶而出.

液氮净化系统只涉及 H₂、N₂、Ar、CH₄ 和 CO 等 5 种化学组分,但涉及的温度范围很广,因此本文选择了 PR-BM 物性方法进行计算^[8]. 进入分子筛的气体中含有 CH₃OH、H₂O、CO₂,其中极性或非极性的气体物性与进入冷箱后的气体物性差别较大,所以本文选择从混合气体进入冷箱时开始模拟,模拟过程均选用经过分子筛的数据,这样模拟结果比较可靠.

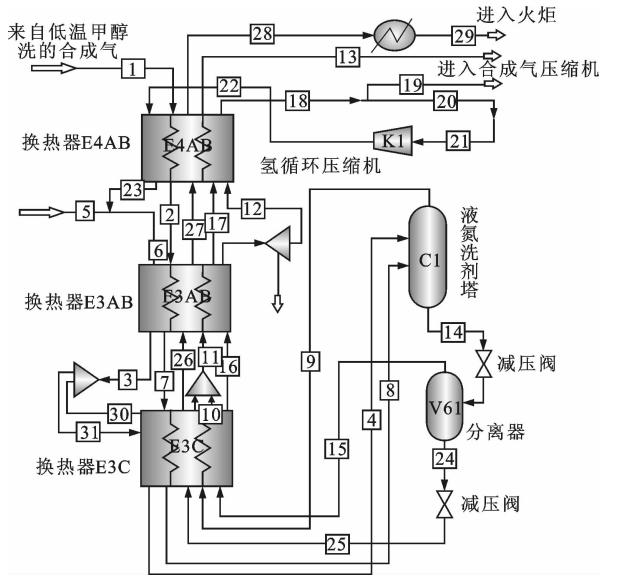
2.2 液氮洗流程分析及改造

利用 Aspen Plus 软件对原工艺流程进行了模拟,模拟流程如图 2 所示.模拟在设计工况下进行,液氮洗涤塔的进出口物流模拟结果与设计值的对比

见表 1,其中塔顶的压力为 7.48 MPa,温度为 81.15 K,塔底的压力为 7.5 MPa,温度为 82.15 K.

表 1 设计工况下液氮洗涤塔进出口物流的模拟结果与设计值对比

物流参数	出口合成气设计值	出口合成气模拟值	塔底液体设计值	塔底液体模拟值
$\varphi(\text{H}_2)/\%$	90.00	89.58	12.29	12.23
$\varphi(\text{N}_2)/\%$	10.00	10.42	31.80	32.01
$\varphi(\text{CO})/\%$	$<5\times 10^{-4}$	4.3×10^{-4}	45.19	44.88
$\varphi(\text{Ar})/\%$	—	—	7.93	8.28
$\varphi(\text{CH}_4)/\%$	—	—	2.79	2.60
流量/ $\text{m}^3\cdot\text{h}^{-1}$	92 147	92 680	7 318	6 925
温度/K	81.15	81.75	82.15	83.25
压力/MPa	7.5	7.5	7.5	7.5



1~31:流股数
图 2 模拟工艺流程

从表 1 可以看到,虽然塔顶出口气体中 CO 体积分数满足了小于 5×10^{-6} 的要求,但在实际操作过程中会因环境的变化使得出口气体中 CO 浓度出现波动,所以净化效果不甚理想. CO 的存在能够引起氨合成催化剂中毒,这对工业生产极为不利. 进口液氮和出口合成气的温度是两个十分关键的因素,这两股物流的温差越小,说明换热器 E3C 的传热效果越好,冷能回收越充分,净化效果就越好.

研究表明,最佳的温差为 2.2 K^[9]. 图 3 反映了液氮洗涤塔 C1 内各化学组分浓度随虚拟塔板数 N 增加的情况,从图 3 中可以看出,各化学组分浓度变

化较为剧烈. 液氮入口的温差为 14.06 K,远大于 2 K 的最优值,这种工况下的焓损失为 $8.509\times 10^7\text{ J/kmol}$,液氮入口的流量为 0.133 5 kmol/s,虚拟塔板数为 18. 这说明,换热器 E3C 的换热效果不好,而且液氮洗涤塔的净化效果也不理想,需要改进整个流程的工艺参数.

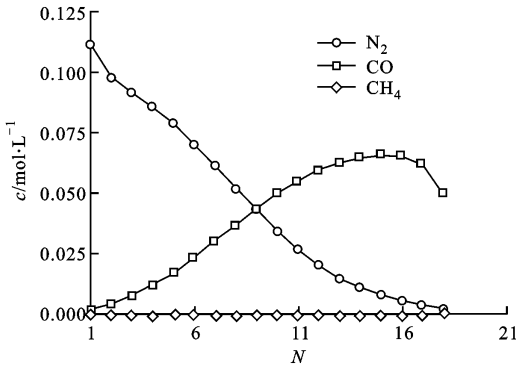


图 3 原工况下塔板内的化学组分浓度

在分离器 V61 之后加入一个减压阀和一个分离器 V62,由此构成的分离器操作压力为 0.25 MPa,操作温度为 79.15K,再在其他参数不变的情况下对整个流程进行模拟. 加入 V62 之前 V61 底部的流股 Q 与加入 V62 之后的流股 H 的对比如表 2 所示.

表 2 工艺改进前后流股比较

流股	温度 /K	压力 /MPa	气体体积分数/%	液体体积分数/%	冷量 / $\text{kJ}\cdot\text{kg}^{-1}$
Q	93.15	1.60	1.1	98.9	-3 458.441
H	79.15	0.25	3.6	96.4	-3 487.987

初步改进流程的模拟结果显示,如果再加入一个分离器,流股在进入换热器时可以多带出 29.546 kJ/kg冷量,这对冷箱内冷量的补充是有益的. 加入的减压阀和分离器都不需要通过额外做功来保证系统运行,而仅需要投入设备和安装费用即可. 液氮洗涤塔出口净化气中 CO 体积分数为 0.55×10^{-6} ,说明净化效果更好.

3 流程优化计算

3.1 超结构模型

根据超结构综合方法,结合多目标遗传算法,液氮洗工艺的优化过程可以由 MINLP 描述. 该非线性模型用二次规划即可准确描述大部分单元过程,但是模型很难求解,因为此类求解常陷于 NP 难问题^[10]. 本文采用 MOGA-QP 在求解超结构中取得

了较好的效果。

根据工艺流程建立的数学模型包括 2 个目标函数,第 1 个目标函数为最小化焓损,它可以评价能量品质,降低焓损可以提高能量的有效利用率。第 2 个目标函数可计算液氮入口温度与塔顶气体温度之差并使其保持在 2 K 左右,原理见 2.2 节。根据改进的工艺流程可以绘制出超结构图,其中改进的局部分支并联接入总图,并通过节点图来表示,见图 4。

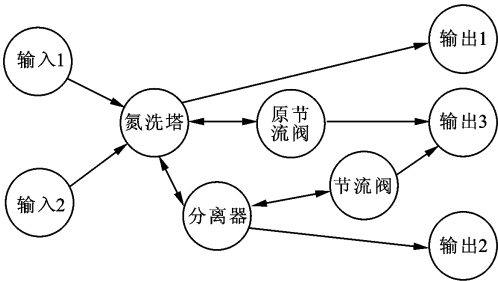


图 4 计算过程节点图

分离器、洗涤塔 C1 的液氮入口温度、液氮流量均是模型的主要变量。利用分离器,赋值为 1,反之赋值为 0,则该优化结构可归结为一个 MINLP 模型,其约束包括净化后的气体中 CO 体积分数小于 5×10^{-6} 、流股热平衡约束、流股质量平衡约束、最小换热温差约束、换热量非负约束、可行温度区间约束以及分流约束。

结合多目标遗传算法和二次规划法联合求解,再将 GA 产生的 Pareto 最优集传递至子问题,以判断是否满足约束条件。以上算法利用 Matlab 编程,并将进化生成的子代导入 Aspen Plus 软件进行规划计算。

3.2 计算结果分析

根据改进方案调整了整个工艺,同时用 2 个目标函数进行了寻优计算,从而获得了新工艺的优化结果。经改造的液氮洗涤塔进出口物流模拟值与优化值对比见表 3。从表 3 可以看出,优化后的出口合成气中的 CO 体积分数为 0.25×10^{-6} ,净化效果优于仅利用 Aspen Plus 软件得到的结果,优化后的出口合成气的流量大于模拟结果,大约提高了 12 320 m^3/h ,这为后续的氨合成提供了更多的原料气,达到了降低吨氨能耗的目的。

图 5 反映了液氮洗涤塔 C1 各塔板经过优化后的状况。从图 5 可以看出,各曲线分布均匀,变化平缓,有利于传热传质稳定、高效地进行。底层塔板气相入口处的化学组分变化明显,随着洗涤塔 C1 中上升物流接近塔顶,化学组分比例及温度变化均

表 3 经改进的液氮洗涤塔进出口物流模拟值与优化值对比

物流参数	出口合成气设计值	出口合成气模拟值	塔底液体设计值	塔底液体模拟值
$\varphi(\text{H}_2)/\%$	89.81	89.59	10.57	10.07
$\varphi(\text{N}_2)/\%$	10.19	10.41	34.72	28.45
$\varphi(\text{CO})/\%$	0.55×10^{-4}	0.25×10^{-4}	31.83	37.39
$\varphi(\text{Ar})/\%$	—	—	8.50	10.82
$\varphi(\text{CH}_4)/\%$	—	—	14.28	13.27
流量/ $\text{m}^3\cdot\text{h}^{-1}$	83 380	95 700	5 725	4 855
温度/K	81.45	81.47	83.18	83.81
压力/MPa	7.3	7.3	7.3	7.3

减小,这个结果与理论分析、模拟结果是一致的。研究表明,液氮入口温差在 3.81 K,接近 2 K 的最优值,此工况下的焓损为 $7.173\times 10^7\text{ J}/\text{kmol}$,优于实际工况,也满足工艺除杂的指标要求,而液氮入口流量减少为 0.131 2 kmol/s ,虚拟塔板数为 34。

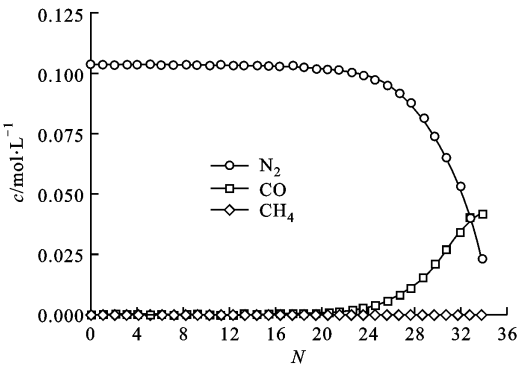


图 5 改进后塔板内的化学组分浓度

3.3 结果比较

在整个低温液氮洗过程中,核心的设备是液氮洗涤塔,它的运行情况直接影响出口净化气中杂质的脱除率,其中最重要的参数是温度。用 Aspen Plus 软件模拟了塔内温度分布,同时与经 MOGA-QP 方法优化后的结果进行了比较,结果如图 6 所示。

从图 6 可以看出,改进后塔内部的温度(曲线 2)比改进前的相应温度(曲线 1)明显降低。在实际工况中,进口的液氮温度较高,从而导致整个液氮洗的操作温度升高 2 K 左右。曲线 2 比曲线 1 平滑。温度曲线分布越均匀,变化越平缓,就越有利于传热传质稳定、高效地进行。曲线 1 和曲线 2 是直接使用 Aspen Plus 软件模拟的结果,受到干板和收敛的影

响,塔板数为18较为适宜.曲线3是利用新算法计算得到的结果,它不受软件模拟过程中收敛及干板的影响,由此获得的最优虚拟塔板数为34,更加接近实际塔板数.曲线3过渡最为平滑,这有利于传热传质进行,在净化满足要求的情况下烟损最小.

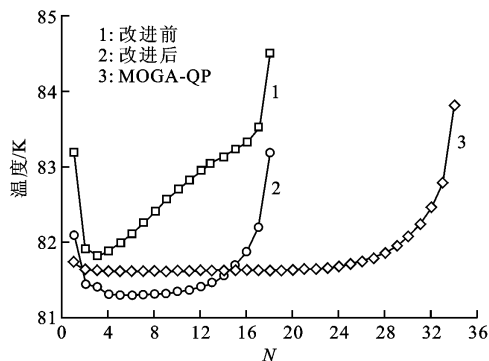


图6 塔板温度模拟比较

4 结 论

本文利用 MOGA-QP 方法对某工厂的低温液氮洗过程进行了模拟分析,并提出了改进方案.

(1) 针对液氮洗原始工艺流程,在设计工况下采用 PR-BM 热力学模型进行了模拟.针对冷箱内冷量不足的问题,在原流程中加入一个减压阀和一个分离器,从而补充冷量 29.546 kJ/kg ,液氮洗涤塔出口净化气中 CO 体积分数为 0.55×10^{-6} .

(2) 利用 MOGA-QP 方法对液氮洗过程进行了优化计算.在满足工艺除杂的前提下,优化后出口合成气中 CO 体积分数为 0.25×10^{-6} ,净化效果优于仅利用 Aspen Plus 得到的结果.优化得到的液氮入口流量为 0.1312 kmol/s ,比原工况减少了 1.7% ;优化后烟损最小值为 $7.173 \times 10^7 \text{ J/kmol}$,比原工况减少了 15.7% .所以,利用本文方法可以避免 Aspen Plus 软件中收敛及干板的影响,优化效果更好.

参考文献:

[1] 颜立伟,余云松,李云,等.吸收法捕集二氧化碳过程的离子浓度软测量[J].化工学报,2010,61(5):1169-1175.
YAN Liwei, YU Yunsong, LI Yun, et al. Soft-sensing study of ion concentration in process of carbon dioxide capture by absorption[J]. Journal of Chemical Industry and Engineering, 2010, 61(5): 1169-1175.

[2] 张早校,冯霄,郁永章.间歇过程热回收目标的研究[J].西安交通大学学报,2000,34(8):79-82.
ZHANG Zaixiao, FENG Xiao, YU Yongzhang. Heat recovery for energy integration of batch processes[J]. Journal of Xi'an Jiaotong University, 2000, 34(8):79-82.
[3] TARAFDER A, RANGAIAH G P, RAY A K. Multi-objective optimization of an industrial styrene monomer manufacturing process[J]. Chemical Engineering Science, 2005, 60(2): 347-363.
[4] YU Weifang, HIDAJAT K, RAY A K. Optimization of reactive simulated moving bed and varicol systems for hydrolysis of methyl acetate[J]. Chemical Engineering Journal, 2005, 112(1/2/3): 57-72.
[5] SILVA C M, BISCAIA E C J. Genetic algorithm development for multi-objective optimization of batch free-radical polymerization reactors[J]. Computers and Chemical Engineering, 2003, 27(8/9): 1329-1344.
[6] BHUTANI N, TARAFDER A, RAY A K, et al. Multi-objective optimization of industrial styrene production using a process simulator and a genetic algorithm[C]//AICHE Annual Meeting. New York, USA:AIChE, 2004:403-414.
[7] 朱平,冯霄.积累烟优化理论及换热过程的积累烟优化[J].西安交通大学学报,2003,37(5):504-507.
ZHU Ping, FENG Xiao. Cumulative exergy theory and optimization of heat exchange processes[J]. Journal of Xi'an Jiaotong University, 2003, 37(5): 504-507.
[8] Aspen Tech Inc. Physical property methods and models[EB/OL]. [2010-05-11]. <http://www.docin.com/p-19163541.html>
[9] 张旭,颜立伟,李云,等.合成氨液氮洗深冷净化过程模拟及分析[J].化工进展,2010,29(S1):484-488.
ZHANG Xu, YAN Liwei, LI Yun, et al. Simulation analysis and optimization of liquid nitrogen washing system in the NH_3 synthesis process[J]. Chemical Industry and Engineering Progress, 2010, 29(S1): 484-488.
[10] YAN Liwei, YU Yunsong, LI Yun, et al. Energy saving opportunities in an air separation process[C/CD]//International Refrigeration and Air Conditioning Conference. Purdue, USA: Purduc University, 2010: 2453.

(编辑 苗凌)