

基于过程模拟与优化的化工工艺改进方法研究

刘益雄 王苗苗 洪明 林志丰
浙江闽锋化学有限公司 浙江 丽水 323000

摘要: 化工产业是国民经济支柱, 却面临生产效率低、能耗高和产品质量不稳定等问题, 传统工艺改进方法成本高、周期长。本文围绕基于过程模拟与优化的化工工艺改进方法展开研究, 阐述过程模拟涉及的模型构建、求解等关键技术, 并探讨其在工艺流程、操作参数及原料产品优化中的应用, 旨在提升化工生产效益, 助力行业可持续发展。

关键词: 过程模拟优化; 化工工艺; 改进方法; 研究

引言: 在化工产业中, 工艺的优劣直接关乎生产效率与产品质量。传统化工工艺存在流程复杂、能耗高、产品质量不稳定等问题。随着科技发展, 过程模拟与优化技术为化工工艺改进带来新契机。通过构建精确模型并求解, 能深入剖析工艺过程, 精准定位问题。利用该技术对化工工艺进行优化, 可有效提升整体性能。因此, 研究基于过程模拟与优化的化工工艺改进方法具有重要的现实意义与应用价值。

1 化工工艺过程模拟概述

化工工艺过程模拟, 指的是通过数学模型对化工生产过程中的物质与能量转化、传递等行为进行模拟分析。作为一种高效的研究与设计手段, 它贯穿化工项目从研发到生产的各个阶段。上世纪中叶, 随着计算机技术的兴起, 化工工艺过程模拟技术开始萌芽。初期, 受计算机性能的限制, 模拟模型较为简单, 仅能处理一些单一反应过程。但伴随计算机运算能力的提升与算法的持续改进, 如今这一技术已能对大规模、复杂的化工工艺流程进行精确模拟。在化工生产设计环节, 工艺过程模拟发挥着不可或缺的作用。设计人员借助模拟软件, 依据化工过程的物理与化学原理, 构建贴合实际生产的模型。通过改变模型参数, 模拟不同工况, 筛选出最优的工艺流程与操作条件, 极大地降低了实验成本, 缩短了设计周期。在实际生产中, 化工工艺过程模拟同样大有可为。企业运用模拟技术对现有装置进行分析, 找出生产瓶颈, 优化操作参数, 从而提升生产效率、降低能耗。此外, 模拟技术还能预测装置在不同原料、负荷条件下的运行情况, 帮助企业应对市场变化, 灵活调整生产策略^[1]。

2 过程模拟关键技术

2.1 模型构建技术

2.1.1 物理模型构建

物理模型构建, 是依据化工过程中物质的物理特性

与行为, 对系统进行简化与抽象。在构建时, 需要充分考虑物质的相态变化、传热传质过程以及流体流动特性。在蒸馏塔的模拟中, 要考虑气液两相的流动与传质, 通过建立相平衡模型和流体力学模型, 对塔内的温度、压力分布, 以及各组分的浓度变化进行精确描述。构建物理模型常采用实验测定与理论分析相结合的方法, 借助实验获取关键的物理参数, 再运用流体力学、传热学等理论, 搭建符合实际的模型。物理模型直观、可靠, 能有效反映系统的物理过程, 广泛应用于换热器、精馏塔、吸收塔等单元操作的模拟, 帮助工程师深入理解设备内的物理现象, 优化设备设计与操作。

2.1.2 化学模型构建

化学模型构建旨在描述化工过程中的化学反应机理与动力学特性。需明确反应体系中的主反应和副反应, 确定反应的化学计量关系。以合成氨反应为例, 不仅要考虑氮气与氢气合成氨的主反应, 还要考虑可能发生的副反应。随后, 通过实验测定反应速率常数、活化能等动力学参数, 运用化学反应动力学理论, 建立反应速率方程。构建化学模型时, 还需考虑反应条件对反应的影响, 如温度、压力、催化剂等。化学模型能为反应过程的优化提供理论依据, 指导反应器的选型与设计, 确定最佳的反应条件, 提高目标产物的选择性与收率, 在石油化工、精细化工等涉及化学反应的领域发挥着重要作用。

2.1.3 数学模型构建

数学模型构建是将物理模型和化学模型进行数学表达, 借助数学工具对化工过程进行量化分析。在构建过程中, 常用的数学方法包括微分方程、代数方程、偏微分方程等。以连续搅拌釜式反应器为例, 通过对反应过程进行物料衡算和能量衡算, 可建立一组微分方程来描述反应器内各组分浓度和温度随时间的变化。为了解这些复杂的数学方程, 常采用数值计算方法, 如有限差分法、有限元法等。数学模型具有通用性和灵活性, 能

方便地进行参数分析与优化计算。它整合了物理模型和化学模型的信息,为化工过程的模拟与优化提供了强大的工具,广泛应用于化工工艺全流程的模拟分析。

2.2 模型求解技术

数值求解方法借助计算机,将连续的数学模型离散化,通过迭代计算获得近似解。有限差分法把求解区域划分为网格,用差商替代微商,将微分方程转化为代数方程组求解。在模拟固定床反应器温度分布时,使用有限差分法将反应器沿轴向和径向划分网格,从而计算各节点温度。有限元法把求解区域分解成有限个单元,对每个单元构建近似函数,进而组合成整体求解方程。数值求解方法适应性强,能处理复杂几何形状和边界条件的模型,广泛应用于化工设备和工艺流程模拟。但它的计算精度依赖网格划分和迭代算法,网格过粗精度欠佳,过细则计算量剧增。

2.2.1 解析求解方法

解析求解方法运用数学推导获取模型精确解,通过建立数学模型并结合初始条件与边界条件,借助积分、变换等数学工具,得出用解析式表达的解。在研究简单的平推流反应器时,对物料衡算方程积分,能得到反应物和产物浓度沿轴向的精确分布。解析解能清晰展示变量间的函数关系,有助于深入理解过程本质,分析参数变化对系统的影响。然而,解析求解对模型的数学形式要求严苛,仅适用于方程简单、边界条件规则的模型。在实际化工过程中,多数模型较为复杂,难以获得解析解,这限制了解析求解方法的应用范围,不过在理论研究和简单过程分析中,它仍具有重要价值。

2.2.2 近似求解方法

近似求解方法在保证一定精度的前提下,对复杂模型简化处理,获取近似解。摄动法在原方程中引入小参数,将解表示为小参数的幂级数,通过逐次逼近求解。在分析反应精馏塔时,针对塔内复杂的气液平衡和反应动力学方程,采用摄动法简化计算。渐近分析法依据问题的特征尺度,对控制方程进行量级分析,忽略次要项,得到简化方程。近似求解方法能降低计算复杂度,节省计算时间^[2]。但近似过程可能引入误差,需要合理评估近似程度,确保结果满足工程要求,常用于对计算速度要求高、精度要求相对较低的工程初步设计和分析场景。

3 化工工艺改进中过程模拟与优化的应用

3.1 工艺流程优化

流程瓶颈是限制整个化工生产流程产能与效率的关键环节。借助过程模拟技术,对全流程进行系统分析,能够精准定位瓶颈所在。以乙烯生产装置为例,裂解

炉、急冷系统和分离系统是主要的产能制约点。通过模拟软件改变各设备的操作参数,监测整个流程的物料平衡与能量平衡,找出导致生产负荷受限的设备或单元。在确定瓶颈后,有针对性地采取优化措施。对于裂解炉,可通过改进燃烧器设计,优化燃料气与原料的混合比例,提升裂解反应效率,从而增加乙烯产量。此外,优化急冷系统的冷却介质流量与温度,能加快反应产物的冷却速度,减少结焦现象,保证装置的长周期稳定运行。消除流程瓶颈不仅能提高生产效率,降低单位产品的能耗与成本,还能提升企业的市场竞争力,使其在激烈的市场竞争中占据优势。

3.1.1 简化流程步骤

复杂的工艺流程不仅增加了设备投资与运行成本,还提高了操作难度和故障风险。运用过程模拟技术,对现有流程进行全面梳理,评估每个步骤的必要性。以传统的芳烃生产工艺为例,部分分离步骤采用多级精馏塔,能耗高且设备占地面积大。通过模拟分析,可引入新型吸附分离技术,直接从原料中分离出目标芳烃产品,大幅减少精馏塔的级数,简化工艺流程。此外,合并功能相似的单元操作,也能有效简化流程。在制药行业,将多个中间产物的提纯步骤整合为一步多效分离,不仅减少了设备数量,还缩短了生产周期,降低了产品的杂质含量。

3.1.2 优化设备布局

合理的设备布局能减少物料输送距离,降低能耗,提高生产效率。借助三维建模与模拟软件,对化工装置内的设备进行虚拟布局。在炼油厂的设计中,根据物料流向与工艺要求,将原油预处理装置、常减压蒸馏装置、催化裂化装置等进行合理安排,使物料在装置间的输送路径最短。考虑设备的安装、维护与检修需求,预留足够的空间。此外,优化管道走向,减少弯头与阀门数量,降低流体阻力,从而降低输送能耗。优化设备布局还能提高装置的安全性,避免危险区域的过度集中。

3.2 操作参数优化

3.2.1 温度与压力优化

在化工生产里,温度和压力对反应速率、平衡转化率以及产品质量影响显著。通过过程模拟,能够深入分析不同反应对温度和压力的要求。以合成甲醇反应为例,该反应是放热且体积减小的过程。模拟结果表明,在较低温度下,反应平衡向生成甲醇的方向移动,但反应速率较慢;而温度过高,副反应增多,甲醇选择性降低。因此,借助模拟软件对反应过程建模,可确定合成甲醇的最佳温度区间。适当提高压力有利于反应正向进

行,但过高的压力会增加设备投资和运行成本,还带来安全隐患。在实际操作中,通过调节冷却介质流量、加热源功率以及压缩机的工作状态,精确控制反应温度和压力。优化温度与压力参数,不仅能提升目标产物的收率和质量,还能降低能耗,延长设备使用寿命,增强化工生产的经济效益和稳定性。

3.2.2 流量与流速优化

流量和流速直接关系到物料在设备内的停留时间、混合效果以及传热传质效率。以管式反应器为例,物料流量和流速会影响反应的进行程度和产物分布。借助过程模拟技术,模拟不同流量和流速下反应器内的流体流动状态,分析其对反应的影响。当流量过小时,反应物不能充分混合,反应速率降低;流量过大,则可能导致反应不完全,产物不合格。在精馏塔操作中,优化进料流量和回流比,能提高塔的分离效率,降低能耗。此外,调节换热器内冷却介质和被冷却物料的流量和流速,可强化传热过程,提升换热器的性能。

3.2.3 反应时间与停留时间优化

反应时间和停留时间对化工反应的效果起着决定性作用。以聚合反应为例,不同的聚合反应对反应时间有严格要求。反应时间过短,聚合度不够,产品性能无法达标;反应时间过长,不仅浪费能源,还可能导致聚合物降解。通过过程模拟,对反应过程进行动态分析,确定最佳反应时间。在流化床反应器中,物料的停留时间影响反应的转化率和选择性。模拟物料在流化床内的流动状态,优化气体分布板结构和操作条件,调整物料的停留时间。对于多段反应过程,合理分配各段的反应时间,能有效提高目标产物的收率。优化反应时间和停留时间,能够在保证产品质量的前提下,提高生产效率,减少设备投资,为化工企业带来显著的经济效益。

3.3 原料与产品优化

3.3.1 原料选择优化

化工生产中,原料的选择直接关乎生产效益与环保成效。借助过程模拟技术,企业可全方位评估原料性能。在己二酸合成中,传统苯法原料来源丰富,但生产环节会产生大量温室气体;新兴的丁二烯法虽然原料成本稍高,却更加绿色环保。模拟技术可分析不同原料的反应活性、转化率,结合后续分离难度,对运输、储存成本进行量化计算。此外,原料对设备的腐蚀性也不容

忽视,通过模拟预测,能提前选择耐腐蚀材料,降低设备维护成本。综合考量多方面因素,企业能找到经济与环保双赢的原料方案,增强自身在市场竞争中的竞争优势,践行可持续发展理念。

3.3.2 产品质量优化

在竞争激烈的市场环境下,产品质量是企业的生命线。以聚酯纤维生产为例,特性黏度、端羧基含量是决定产品品质的关键指标。运用过程模拟,研究温度、压力、催化剂用量对反应进程的影响,从而确定最佳反应参数,减少产品质量波动。在分离与提纯环节,模拟可筛选合适的工艺。如采用萃取精馏代替普通精馏,能显著提高产品纯度。搭配实时质量监测系统,将检测数据反馈至模拟模型,系统会迅速给出参数调整建议,实现生产过程的动态优化,持续稳定地输出高品质产品,助力企业树立良好的品牌形象。

3.3.3 产品种类拓展优化

随着市场需求日益多元化,企业有必要拓展产品种类。在氯碱化工行业,除生产烧碱、氯气等基础产品外,通过过程模拟,能评估利用现有装置生产氯乙酸、环氧氯丙烷等高附加值产品的可行性。模拟过程中,对物料平衡、能量消耗、设备负荷进行细致分析,预测新产品的生产成本与市场收益。同时,充分考量新产品与现有产品在工艺上的兼容性,共享部分生产流程与设备,降低新增投资^[3]。

结束语

本文围绕过程模拟与优化,深入探索化工工艺的改进路径,系统剖析模型构建、求解技术,以及它们在化工工艺多环节的实际应用。这些方法有效提高了化工生产的精细化水平,显著提升了生产效益、产品质量,并推动行业的绿色转型。展望未来,人工智能、大数据与过程模拟技术的深度融合,将进一步拓展工艺优化的边界。

参考文献

- [1]罗小平.化工过程模拟与优化技术研究进展[J].化工进展,2021,34(1):23-29.
- [2]张志强.大型化工工艺流程的数学模型模拟方法[J].化工自动化及仪表,2021,45(6):441-445.
- [3]李晓伟.化工系统过程模拟与优化综述[J].当代化工,2022,51(2):407-412.