

研究论文

# 采用浓度差同步优化的质量交换网络设计

都 健, 高志辉, 陈 理, 姚平经  
(大连理工大学化工学院, 辽宁 大连 116012)

**摘要:** 质量交换网络 (MEN) 综合作为过程集成的一个分支, 越来越受到过程系统工程领域的广泛关注。因为质量交换网络综合时, 贫、富流通股之间对应的浓度差 ( $\epsilon$ ) 反映传质推动力, 影响操作费用和投资费用的大小, 所以对其进行优化意义重大。而现有的质量交换网络综合设计一般将贫、富流通股之间对应的最小允许浓度差假设为固定值, 不能保证得到最优的质量交换网络。针对这一问题, 介绍了一种同步优化方法, 既能处理单杂质体系, 又能处理多杂质体系, 建立质量交换网络的超结构模型, 以年度总费用 (TAC) 最小为目标, 将每一对贫、富流通股对应的浓度差作为变量, 权衡操作费用和投资费用, 并利用改进的遗传算法求解, 同步得到年度总费用的最小值以及对应的一组最优浓度差, 从而得到最优的质量交换网络。

**关键词:** 质量交换网络; 浓度差; 同步优化; 多级超结构

中图分类号: TQ 021.8

文献标识码: A

文章编号: 0438-1157 (2007) 07-1768-08

## Mass exchange network design using simultaneous optimization of composition differences

DU Jian, GAO Zhihui, CHEN Li, YAO Pingjing

(School of Chemical Engineering, Dalian University of Technology, Dalian 116012, Liaoning, China)

**Abstract:** As one of the branches of process integration, the synthesis of mass exchange network (MEN) has attracted more and more attention in the area of process systems engineering. When synthesizing a MEN, the composition differences ( $\epsilon$ ) reflect the impetus of mass transfer between rich and lean streams and affect the operating cost and capital cost significantly, so they should be optimized in order to obtain a real optimal MEN. However, so far they are usually given arbitrary values in most literatures, which cannot guarantee an optimum MEN obviously. This paper presents a simultaneous method to solve the problem of  $\epsilon$  in a single-contaminant or multi-contaminants system, which builds the superstructure model of the MEN first, takes total annualized cost (TAC) as an objective and considers  $\epsilon$  as a set of variables to balance operating cost and capital cost. Then the mathematical model is solved by means of an improved genetic algorithm. Finally, the minimum TAC and corresponding  $\epsilon$  values, as well as an optimal MEN are also obtained simultaneously.

**Key words:** mass exchange network; composition difference; simultaneous optimization; multilevel superstructure

### 引 言

热量传递和质量传递是化学工业中两个重要的

过程, 它们对化工企业的投资费用和操作费用的影响重大。质量交换网络综合是重要的过程系统综合之一, 质量交换操作不仅在化学工业的原料预处

理、产品的提纯中有广泛的应用，20世纪80年代中后期，随着可持续发展战略的提出以及人们对环境保护呼声的日益增加，社会对工厂的废物排放要求越来越高，要求各个企业必须严格按照排污标准，对有毒或者造成环境污染的物质必须从排放物中除去或者降低到允许的排放标准，因此质量交换网络综合在废物处理、有用组分回收等方面也得到了发展的良机。

质量交换网络综合的概念最早是由 El-Halwagi等<sup>[1]</sup>根据质量交换网络和换热网络在系统水平上有非常大的相似性而提出的，他们采用夹点方法设计网络结构，最后使富流通股达到排放标准。随后，El-Halwagi等<sup>[2]</sup>又采用基于夹点技术的浓度间隔表法对贫、富流通股对应的一组浓度差进行了优化，但这一方法先以操作费用最小为目标进行优化，然后再以传质单元数最少为目标优化网络结构，使用了分步策略，而且传质单元数最少不能保证网络费用最小<sup>[3]</sup>。所以，后来人们又提出了状态空间法<sup>[4]</sup>、分层决策法<sup>[5]</sup>以及超结构<sup>[6]</sup>等方法。其中，Chen等<sup>[7]</sup>提出的多级超结构质量交换网络综合方法能够处理多杂质的复杂系统，且不依赖于夹点技术，但该方法先假定了贫、富流通股之间对应的最小允许浓度差，各贫、富流通股对应的浓度差不能低于这个给定值。而实际操作中，不同贫、富流通股流经不同的设备传质时需要的最小推动力是不一样的，其大小取决于流通股特性、流通股间的浓度差以及传质设备等因素。本文在保证浓度差的取值为正数的前提下，作为优化变量，对其进行优化，考虑了更加复杂的情况，如多流通股多杂质体系，将各贫、富流通股间不同组分对应的浓度差作为优化变量，以年度总费用最小为目标建立多级超结构数学模型，同步优化浓度差和质量交换网络。

## 1 问题描述

质量交换网络综合问题是：给定一系列已知流量为  $G_i (i=1, 2, \dots, N_R)$  的过程流通股（富流通股） $R_i$ ，需要将其中所携带的杂质  $p (p=1, 2, \dots, N_p)$  由初始浓度  $Y_{i,p}^{\text{in}}$  降到目标浓度  $Y_{i,p}^{\text{out,lim}}$ ，另有一系列不含或者含有少量杂质  $p$  的贫流通股（质量交换剂） $S_j (j=1, 2, \dots, N_S)$ ，其杂质的初始浓度和目标浓度  $X_{j,p}^{\text{in}}, X_{j,p}^{\text{out,lim}}$  均已知，每一对贫、富流通股之间的传质平衡关系也已知。为了避免使用无限大的质量交换器，需要加一个正推动力，其值与操

作费用呈正比，与投资费用呈反比，本文中将其作为变量进行优化，最后的优化值称为最优浓度差，符号为  $\epsilon_{i,j,p}$ 。假设贫、富流通股组间的传质平衡关系为线性，则其平衡关系可表示为

$$y_{i,p} = m_{i,j,p}(x_{j,p} + \epsilon_{i,j,p}) + b_{i,j,p} \quad (1)$$

式中  $i=1, 2, \dots, N_R; j=1, 2, \dots, N_S; p=1, 2, \dots, N_p$ ， $m_{i,j,p}$  和  $b_{i,j,p}$  是常数，其值主要取决于贫、富流股本身的性质以及操作条件（如温度、压强和组成等），但对于多组分复杂体系，其中任何一对贫、富流通股之间的平衡关系也会受到其他组分的相互影响。

本文将杂质  $p$  在每一对贫、富流通股间对应的浓度差  $\epsilon_{i,j,p}$  作为优化变量，为了避免夹点设计法的不足，本文采用了基于多级超结构的方法建立非线性规划模型，该模型不依赖于夹点位置，包含了贫、富流通股各种可行的结构方案，采用多级法则考虑了各个流通股是用分流进行匹配或不分流直接进行匹配这两种可能。由于超结构考虑了各种可能的选择，因此形成了一个大规模的组优化问题，模型相对比较复杂，用一般的方法进行优化求解很难保证收敛，所以本文利用改进的遗传算法进行求解，通过调整一组  $\epsilon_{i,j,p}$  的值，权衡了操作费用和投资费用的大小，最后得到年度总费用最小的质量交换网络结构以及一组优化的浓度差的值。

另外，由于通常的质量交换网络中杂质在贫、富流通股中的浓度比较小，它们的传质对流通股流量变化的影响很小，因此，常常假设通过质量交换网络后的贫、富流通股的质量流量不变。

## 2 浓度差和质量交换网络同步优化的综合方法

当对一个复杂的大系统进行优化设计时，往往存在大量供选择的可行结构方案，对其结构设计所造成的大规模组优化问题给过程综合的模型化带来了很大的困难，不能盲目地穷举搜索来寻找最优解。利用超结构的方法能有效地建立包含多种可行方案的模型，为解决复杂系统的结构设计问题带来了方便。

### 2.1 浓度差和质量交换网络同步优化的超结构模型

超结构是指考虑了各种可供选择的结构方案，是较大规模的组优化问题。对于每一个流通股，考虑了用分流流通股或者不分流与其他流通股进行匹配，以及处理后流通股能否达到目标浓度，可通过增加超结构

的级数的方法满足这一要求。因此，为了考虑贫、富流股各种可能的匹配方式，须使用多级超结构<sup>[7]</sup>的方法。过程所需的级数一般不超过富流股或者贫流股的最大数目，即  $N_k = \max \{N_R, N_S\}$ 。对于两个富流股和两个贫流股在第  $k$  级的匹配如图 1 所示。

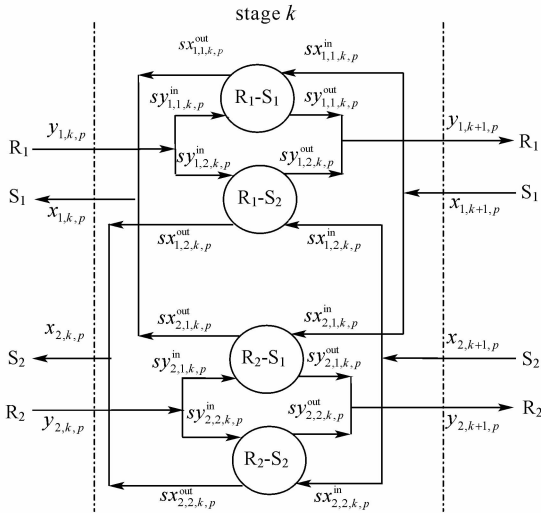


图 1 分级式的超结构

Fig. 1 Structure of stage-wise superstructure

图 1 表示在第  $k$  级第  $i$  个富流股  $R_i$  与第  $j$  个贫流股  $S_j$  进行匹配传质时，进口处富、贫流股中待处理杂质  $p$  的浓度分别为  $sy_{i,j,k,p}^{in}$ 、 $sx_{i,j,k,p}^{in}$ ，出口浓度分别为  $sy_{i,j,k,p}^{out}$ 、 $sx_{i,j,k,p}^{out}$ 。在第  $k$  级出口处，富、贫流股中各分流流股合并，合并后的浓度分别为  $y_{i,k+1,p}$ 、 $x_{j,k,p}$ ，其值可由各分流流股流率和出口处杂质  $p$  的浓度来确定。

### 2.2 超结构数学模型的建立

根据上面的多级超结构，可以建立以年度总费用为目标的非线性规划 (NLP) 模型。

目标函数：年度总费用 ( $f$ ) 最小，包括操作费用 ( $f_o$ ) 和投资费用 ( $f_c$ )，即

$$\min(f) = \min(f_o + f_c) \quad (2)$$

其操作费用的大小与贫流股的流量以及单位流股的费用有关，计算公式如下

$$f_o = \sum_{j=1}^{N_S} c_j L_j \quad (3)$$

投资费用主要指设备费用，如常用的质量交换器——板式塔和填料塔。对于板式塔，其费用的大小取决于使用的塔板数目  $N_{i,j,k,p}$  以及每块塔板的费用  $c'_{i,j,k}$ 。计算公式如下

$$f_c = \sum_{i=1}^{N_R} \sum_{j=1}^{N_S} \sum_{k=1}^{N_k} c'_{i,j,k} (\max \{N_{i,j,k,p}\}_{p=1,2,\dots,N_p}) \quad (4)$$

其中， $c'_{i,j,k}$  的大小取决于传质设备的类型、材料和大小以及不同的流股和操作条件等；板式塔的塔板数目  $N_{i,j,k}$  可由 Kremser 方程<sup>[8]</sup> 计算求得。

对于填料塔，其费用的大小取决于塔的有效高度  $H_{i,j,k,p}$  以及单位等效塔板高度的费用。计算公式如式 (5) 所示。

$$f_c = \sum_{i=1}^{N_R} \sum_{j=1}^{N_S} \sum_{k=1}^{N_k} c''_{i,j,k} (\max \{H_{i,j,k,p}\}_{p=1,2,\dots,N_p}) \quad (5)$$

其中，单位等效塔板高度的投资费用  $c''_{i,j,k}$  的大小取决于传质设备的类型、尺寸大小以及操作条件和流股等；而填料层的高度  $H_{i,j,k,p}$  可由式 (6) 进行计算<sup>[9]</sup>

$$H_{i,j,k,p} = HTU_{i,j,k,p} \times NTU_{i,j,k,p} \quad (6)$$

式中  $HTU_{i,j,k,p} = \frac{g_{i,j,k}}{K_y a s}$

$$NTU_{i,j,k,p} = \left[ (sy_{i,j,k,p}^{in} - sy_{i,j,k,p}^{out}) \times \right.$$

$$\left. \ln \left( \frac{sy_{i,j,k,p}^{in} - m_{i,j,p} sx_{i,j,k,p}^{out} - b_{i,j,p}}{sy_{i,j,k,p}^{out} - m_{i,j,p} sx_{i,j,k,p}^{in} - b_{i,j,p}} \right) \right] /$$

$$\left[ (sy_{i,j,k,p}^{in} - m_{i,j,p} sx_{i,j,k,p}^{out} - b_{i,j,p}) - (sy_{i,j,k,p}^{out} - m_{i,j,p} sx_{i,j,k,p}^{in} - b_{i,j,p}) \right]$$

$K_y a$  表示总体积传质系数， $s$  表示贫、富流股相互接触的传质表面积。

除这两种传质单元设备的计算方法外，还有很多计算设备投资费用的公式，具体的设备投资费用计算方法须视实际设备的类型和材料而定。

约束条件：

组分  $p$  的总质量衡算

$$G_i Y_{i,p}^{in} = G_i Y_{i,p}^{out} + \sum_k \sum_j g_{i,j,k} (sy_{i,j,k,p}^{in} - sy_{i,j,k,p}^{out}) \quad (7)$$

$$L_j X_{j,p}^{out} = L_j X_{j,p}^{in} + \sum_k \sum_i l_{i,j,k} (sx_{i,j,k,p}^{out} - sx_{i,j,k,p}^{in}) \quad (8)$$

每一级内总质量衡算

$$G_i = \sum_{j=1}^{N_S} g_{i,j,k} \quad (9)$$

$$L_j = \sum_{i=1}^{N_R} l_{i,j,k} \quad (10)$$

每一级内组分  $p$  的质量衡算

$$G_i y_{i,k} = G_i y_{i,k+1} + \sum_{j=1}^{N_S} g_{i,j,k} (sy_{i,j,k,p}^{in} - sy_{i,j,k,p}^{out}) \quad (11)$$

$$L_j x_{j,k+1} = L_j x_{j,k} + \sum_{i=1}^{N_R} l_{i,j,k} (s x_{i,j,k,p}^{\text{in}} - s x_{i,j,k,p}^{\text{out}}) \quad (12)$$

各传质单元传递组分  $p$  的质量衡算

$$g_{i,j,k} (s y_{i,j,k,p}^{\text{in}} - s y_{i,j,k,p}^{\text{out}}) = l_{i,j,k} (s x_{i,j,k,p}^{\text{out}} - s x_{i,j,k,p}^{\text{in}}) \quad (13)$$

每一级分割或混合处组分  $p$  的质量衡算

$$G_i y_{i,k} = \sum_{j=1}^{N_S} g_{i,j,k} s y_{i,j,k,p}^{\text{in}} = \sum_{j=1}^{N_S} g_{i,j,k-1} s y_{i,j,k-1,p}^{\text{out}} \quad (14)$$

$$L_j x_{j,k} = \sum_{i=1}^{N_R} l_{i,j,k} s x_{i,j,k,p}^{\text{out}} = \sum_{i=1}^{N_R} l_{i,j,k-1} s x_{i,j,k-1,p}^{\text{in}} \quad (15)$$

各流股出口处组分  $p$  的浓度限制

$$Y_{i,p}^{\text{out}} \leq Y_{i,p}^{\text{out,lim}} \quad (16)$$

$$X_{j,p}^{\text{out}} \leq X_{j,p}^{\text{out,lim}} \quad (17)$$

各传质单元对应的组分  $p$  的传质可行性限制

$$s y_{i,j,k,p}^{\text{in}} - m_{i,j,p} (s x_{i,j,k,p}^{\text{out}} + \epsilon_{i,j,p}) - b_{i,j,p} \geq 0 \quad (18)$$

$$s y_{i,j,k,p}^{\text{out}} - m_{i,j,p} (s x_{i,j,k,p}^{\text{in}} + \epsilon_{i,j,p}) - b_{i,j,p} \geq 0 \quad (19)$$

### 2.3 数学模型的分析

本文建立的质量交换网络多级超结构模型是一个 NLP 问题，与 Chen 等<sup>[7]</sup>用常规超结构得到的 MINLP 模型比较见表 1，其中  $N_E$  表示过程中贫、富流股各组分对应的传质平衡方程个数，相对于总变量数其值一般较小。由比较结果可知，本文模型总变量数少于 MINLP 模型；传质浓度差作为优化变量是一组连续变量，且变量数只增加  $N_E$ ，对总变量数及模型求解难度的影响不大；MINLP 模型用 0-1 变量确定质量交换器的取舍，形成一个非凸的、不连续的、有多个局部极值的大规模组合优化的问题<sup>[10]</sup>，求解难度大<sup>[11]</sup>，效率很低<sup>[12]</sup>，而本文的 NLP 模型没有使用 0-1 变量，通过进出质量交换器的流股流量大小判断设备是否采用，增加了模型的连续性，防止了变量数迅速增加的大规模组合爆炸问题，易求解，更符合工程实际，能够有

效解决大规模多组分质量交换网络综合问题<sup>[13]</sup>。

目前对于非线性问题的求解主要有两个分支，以数学规划为代表的确定性算法和以遗传算法、模拟退火算法<sup>[14]</sup>为代表的随机进化算法。本文采用了改进的自适应模拟退火遗传算法<sup>[15]</sup>在进化过程中保证产生的解均可行，全局搜索，反复迭代，最后得到多级超结构模型的最优解。

### 3 同步优化的实例

本文用两个例子来说明采用浓度差同步优化的质量交换网络的过程与特点。一个是除去工业流股中氨气的例子，属于单杂质的问题；另一个是除去焦炉气中的硫化氢和二氧化碳实例，属于多杂质的问题。

#### 3.1 单杂质实例

本实例来源于文献 [16]。在工业生产中，有 5 个主要组成为空气的气相流股，为了净化空气，要除去其中的氨气。可供选择的贫流股有 3 个，两个过程贫流股  $S_1$  和  $S_2$ ，一个外加质量交换剂  $S_3$ ，流股数据如表 2 所示。由于仅含一个杂质，即  $N_p = 1$ ，所以在计算过程中将下标  $p$  省略了。

Szitzkai 等<sup>[17]</sup>使用 MINLP 模型对上述过程作了优化，为了与其进行比较，本例假设处理过程的质量交换器均为填料塔，投资费用的计算使用文献 [17] 提供的计算式

$$TCC = 1.1 N_{\text{units}} \times \$ 618 \left( \frac{\sum_{i,j,k} \text{mass}_{i,j,k}}{N_{\text{units}}} \right)^{0.66}$$

式中  $N_{\text{units}}$  表示过程中的质量交换器的个数，设备投资费的年度化系数为 0.225，贫流股  $S_3$  的单价为  $\$ 0.001 \text{ kg}^{-1}$ ，每年工作 8150 h。

表 1 本文关于 NLP 模型和 MINLP 模型比较

Table 1 Comparison of MINLP model with NLP model in this paper

Item	MINLP model <sup>[7]</sup>	NLP model in this paper
number of optimization variables	$(N_R + N_S + 3N_R N_S) N_k N_p + 3N_R N_S N_p + N_S$	$(N_S N_p + 2N_S - 1) N_R N_k$
number of binary variables	$N_R N_S N_p$	0
number of composition differences variables	$N_E$	$N_E$
number of total variables	$(N_R + N_S + 3N_R N_S) N_k N_p + 4N_R N_S N_p + N_S + N_E$	$(N_S N_p + 2N_S - 1) N_R N_k + N_E$

表 2 单杂质实例的流股数据

Table 2 Streams data of single-contaminant example

Rich stream	$G_i/\text{kg} \cdot \text{s}^{-1}$	$Y_i^{\text{in}}$	$Y_i^{\text{out,lim}}$	Lean stream	$L_j^{\text{lim}}/\text{kg} \cdot \text{s}^{-1}$	$X_j^{\text{in}}$	$X_j^{\text{out,lim}}$
R <sub>1</sub>	2.0	0.005	0.0010	S <sub>1</sub>	1.8	0.0017	0.0071
R <sub>2</sub>	4.0	0.005	0.0025	S <sub>2</sub>	1	0.0025	0.0085
R <sub>3</sub>	3.5	0.011	0.0025	S <sub>3</sub>	∞	0	0.017
R <sub>4</sub>	1.5	0.010	0.0050				
R <sub>5</sub>	0.5	0.008	0.0025				

文献 [17] 中给出了氨气在贫、富流股中的传质平衡关系如下

$$S_1 : y_i = 1.2x_i; \quad S_2 : y_i = x_i; \quad S_3 : y_i = 0.5x_i$$

其中,  $i=1, 2, 3, 4, 5$  分别表示 5 个富流股。应用上面所构造的模型,  $N_k = \max \{N_R, N_S\} = 5$ , 因此须建立五级超结构, 贫、富流股之间需要 75 个传质单元相匹配。设各传质浓度差分别为  $\epsilon_j$ , 并设  $g_{i,j,k}$ ,  $l_{i,j,k}$  及  $sY_{i,j,k}^{\text{out}}$ ,  $sX_{i,j,k}^{\text{out}}$  分别表示富、贫流股在每一级对应的分流流率以及流经每一个传质单元的出口浓度。本例总共有 203 个独立的优化变量, 以年度总费用为目标函数, 式 (7) ~ 式 (19) 作为约束条件, 各个变量在其可行解区间任意给定初值, 采用改进的遗传算法迭代求解, 最后得到如图 2 所示的优化的质量交换网络。

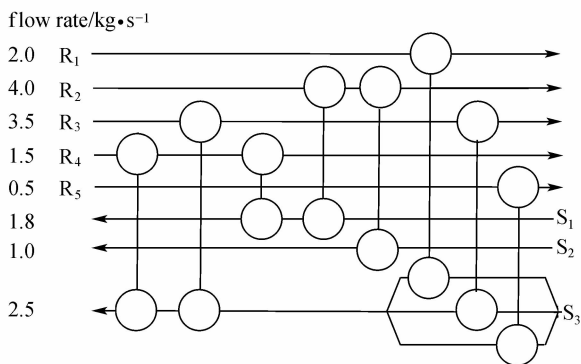


图 2 单杂质实例优化的质量交换网络结构

Fig. 2 Optimal MEN of single-contaminant example

各传质单元贫富流股的流量、进出口氨气的浓度及传质负荷等结果见表 3。本文优化得到的浓度差与 Szitkai 的优化结果 (由文献 [17] 网络结构求得) 比较见表 4, 本文计算得到的浓度差的值小于文献 [17] 值, 因此节省了贫流股 S<sub>3</sub> 的用量, 降低了操作费用, 由此也证明了对浓度差进行优化的必要性。

表 3 单杂质实例的详细优化结果

Table 3 Detailed results of single-contaminant example

Unit	$l_{i,j,k}$ /kg · s <sup>-1</sup>	$sX_{i,j,k}^{\text{in}}$	$sX_{i,j,k}^{\text{out}}$	$g_{i,j,k}$ /kg · s <sup>-1</sup>	$sY_{i,j,k}^{\text{in}}$	$sY_{i,j,k}^{\text{out}}$	mass <sub>i,j,k</sub> /kg · s <sup>-1</sup>
1	2.50	0.0163	0.017	1.5	0.01	0.0088	0.0018
2	2.50	0.0079	0.0163	3.5	0.011	0.005	0.021
3	1.80	0.0039	0.0071	1.5	0.0088	0.005	0.0057
4	1.80	0.0017	0.0039	4.0	0.005	0.004	0.004
5	1.00	0.0025	0.0085	4.0	0.004	0.0025	0.006
6	1.01	0	0.0079	2.0	0.005	0.001	0.008
7	1.14	0	0.0079	3.5	0.005	0.0025	0.009
8	0.35	0	0.0079	0.5	0.008	0.0025	0.0028

表 4 传质浓度差的比较

Table 4 Comparison of composition differences

Strategy	$\epsilon_1$	$\epsilon_2$	$\epsilon_3$
MINLP model <sup>[17]</sup>	$4 \times 10^{-4}$	$4 \times 10^{-4}$	$4 \times 10^{-4}$
this paper	$2 \times 10^{-6}$	$1 \times 10^{-6}$	$1 \times 10^{-6}$

表 5 列出了本文计算结果与其他文献的计算结果, 可见, 因本文提出的方法不依赖于夹点, 且以年度总费用为目标权衡操作费和投资费, 计算结果比 Hallale 的基于夹点的方法优化; 与 Szitkai 等<sup>[17]</sup> 基于超结构的 MINLP 模型结果比较, 本文采用的多级超结构模型将传质浓度差分别进行了同步优化, 在调整了贫、富流股匹配后, 虽没有减少质量交换器个数, 外加贫流股的流量却比原来降低了 14%, 年度总费用下降了 9.7%, 从而得到了更优的质量交换网络结构。

### 3.2 多杂质实例

焦炉气的处理过程中<sup>[1]</sup>有两股废气 R<sub>1</sub> 和 R<sub>2</sub>, 为保护环境, 要求除去其中的 H<sub>2</sub>S ( $p=1$ ) 和 CO<sub>2</sub> ( $p=2$ ) 杂质。可选用的吸收杂质的贫流股为稀氨水 (S<sub>1</sub>) 和甲醇 (S<sub>2</sub>)。两个贫流股对应的年度总费用分别为 117360 \$ 和 176040 \$。富、贫流股的流量和进出口浓度限制等数据如表 6 所示。

表 5 单杂质实例的结果比较

Table 5 Result comparison of single-contaminant example

Item	Objective function	External MSA/kg · s <sup>-1</sup>	TCC/\$	TAC/\$ · a <sup>-1</sup>
minimal utility <sup>[16]</sup>	TCC	2.48	298000	140000
MINLP model <sup>[17]</sup>	TAC	2.904	210520	134000
this paper	TAC	2.50	210520	121000

表 6 多杂质实例的流股数据

Table 6 Streams data of multi-contaminants example

Rich stream	$G_i$ /kg · s <sup>-1</sup>	$Y_{i,1}^{in}$	$Y_{i,2}^{in}$	$Y_{i,1}^{out,lim}$	$Y_{i,2}^{out,lim}$	Lean stream	$L_j^{lim}$ /kg · s <sup>-1</sup>	$X_{j,1}^{in}$	$X_{j,2}^{in}$	$X_{j,1}^{out,lim}$	$X_{j,2}^{out,lim}$
R <sub>1</sub>	0.9	0.07	0.06	0.0003	0.005	S <sub>1</sub>	2.3	0.0006	0	0.031	0.171
R <sub>2</sub>	0.1	0.051	0.115	0.0001	0.01	S <sub>2</sub>	∞	0.0002	0	0.0035	0.103

例题中给出了杂质 H<sub>2</sub>S 和 CO<sub>2</sub> 在贫、富流股中的传质平衡关系如下

$$y_{i,1} = 1.45x_{1,1}; \quad y_{i,1} = 0.26x_{2,1};$$

$$y_{i,2} = 0.35x_{1,2}; \quad y_{i,2} = 0.58x_{2,2}$$

其中,  $i=1, 2$  分别表示两个富流股 R<sub>1</sub> 和 R<sub>2</sub>。

由  $N_k = \max \{N_R, N_S\} = 2$  可知, 本例用两级超结构, 贫、富流股之间需要 8 个传质单元相匹配。首先假设各对匹配的贫、富流股对应的传质浓度差分别为  $\epsilon_{i,1,1}$ 、 $\epsilon_{i,2,1}$ 、 $\epsilon_{i,1,2}$ 、 $\epsilon_{i,2,2}$  ( $i=1, 2$ )。本例总共有 32 个独立的优化变量, 以年度总费用为目标函数, 以式 (7) ~ 式 (19) 作为约束条件, 各个变量在其可行解区间任意给定初值, 采用改进的遗传算法迭代求解, 最后得到如图 3 所示的优化的质量交换网络结构。

得到的浓度差的值并不都大于 0.0001, 但是得到的 TAC 比文献值下降。由图 3 可以看出, 本文得到了与文献 [7] 相似的网络结构: 在超结构的两级, 两个贫流股分别分流与两个富流股以板式塔进行匹配传质。由表 8 的计算结果可以看出, 本文通过将传质浓度差作为决策变量和质量交换网络同步优化, 其计算结果比文献 [7] 给定最小允许浓度差而得到的结果稍好一些。其原因是减小 S<sub>1</sub> 的流量而增大 S<sub>2</sub> 的流量, 使得传质设备 1 的负荷增加而传质设备 3 的负荷减少, 虽然操作费用略有增加, 但却充分利用了传质单元 1, 使其潜能得到了有效发挥, 传质单元年度投资费用大幅度下降, 即塔板数减少引起的投资费降低的值比贫流股流量增加引起的操作费增加的值大, 从而年度总费用比原来减少了约 4%。因此, 本文的设计方法可以得到更优的质量交换网络。

flow rate/kg · s<sup>-1</sup>

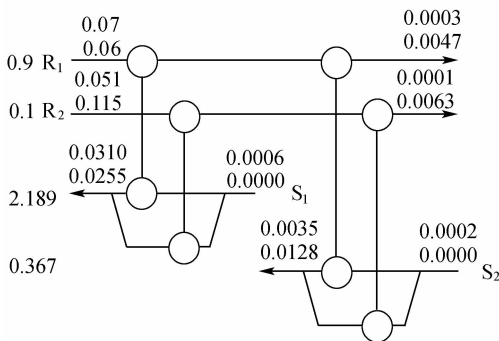


图 3 多杂质实例优化的质量交换网络结构

Fig. 3 Optimal MEN of multi-contaminants example

每一组分在各传质单元进出口的贫富流股中的浓度、各流股的流量及各传质单元塔板数目等结果见表 7。本文优化得到的浓度差与 Chen 等<sup>[7]</sup> 的优化结果 (由网络结构求得) 比较见表 8, 本文计算

## 4 结 论

针对多流股的单杂质和多杂质体系, 本文将每一对流股匹配对应的传质浓度差作为变量, 权衡操作费用和设备投资费用的影响, 然后以年度总费用为目标函数, 以质量衡算、浓度及可行性限制等作为约束条件, 建立多级超结构的非线性规划模型, 该模型包含了各种可行方案, 避免引入混合整数 0-1 变量从而简化了优化求解的复杂性。本文在优化变量可行的解区间内给定初值, 利用改进的遗传算法进行迭代求解, 在进化过程中产生的解均可行, 最后同步得到了最优的浓度差以及相对应的质量交换网络结构。本文对两个实例的计算结果均表

表 7 多杂质实例详细优化结果

Table 7 Detailed result of multi-contaminants example

Unit	H <sub>2</sub> S				CO <sub>2</sub>				$l_{i,j,k}$ /kg · s <sup>-1</sup>	Plate number
	$s_{i,j,k,1}^{in}$	$s_{i,j,k,1}^{in}$	$s_{i,j,k,1}^{out}$	$s_{i,j,k,1}^{out}$	$s_{i,j,k,2}^{in}$	$s_{i,j,k,2}^{in}$	$s_{i,j,k,2}^{out}$	$s_{i,j,k,2}^{out}$		
1	0.0700	0.0006	0.0013	0.0337	0.0600	0.0000	0.0083	0.0249	1.868	11
2	0.0510	0.0006	0.0034	0.0151	0.1150	0.0000	0.0212	0.0289	0.321	3
3	0.0013	0.0002	0.0003	0.0035	0.0083	0.0000	0.0047	0.0119	0.269	3
4	0.0034	0.0002	0.0001	0.0035	0.0212	0.0000	0.0063	0.0152	0.098	3

表 8 多杂质实例的结果比较

Table 8 Result comparison of multi-contaminant example

Strategy	Objective function	$L_1$ /kg · s <sup>-1</sup>	$L_2$ /kg · s <sup>-1</sup>	$\epsilon_{i,1,1}$	$\epsilon_{i,1,2}$	$\epsilon_{i,2,1}$	$\epsilon_{i,2,2}$	TCC /\$ · a <sup>-1</sup>	TAC /\$ · a <sup>-1</sup>
Ref. [7]	TAC	2.195	0.331	$3.0 \times 10^{-4}$	$2.4 \times 10^{-2}$	$1.8 \times 10^{-4}$	$2.4 \times 10^{-3}$	113800	429700
this paper	TAC	2.189	0.367	$6.5 \times 10^{-5}$	$9.8 \times 10^{-3}$	$1.9 \times 10^{-5}$	$1.2 \times 10^{-4}$	91000	412500

明该方法可以得到较优的质量交换网络结构。因此, 本方法能够用于大规模多组分质量交换网络综合优化。

符 号 说 明

- $b$ ——组分在流股间传质平衡方程对应的截距
- $c$ ——贫流股的单位价格, \$ · a<sup>-1</sup>
- $c'$ ——板式塔每一块塔板的价格, \$ · a<sup>-1</sup>
- $c''$ ——填料塔单位填料层高度的价格, \$ · a<sup>-1</sup>
- $G$ ——富流股的质量流率, kg · s<sup>-1</sup>
- $g$ ——富流股的分流质量流率, kg · s<sup>-1</sup>
- $H$ ——填料塔的填料层高度, m
- $L$ ——贫流股的质量流率, kg · s<sup>-1</sup>
- $l$ ——贫流股的分流质量流率, kg · s<sup>-1</sup>
- $m$ ——组分在流股间传质平衡方程对应的斜率
- mass——组分在流股间传递的杂质负荷
- $N$ ——流股或塔板数目
- $s_x$ ——贫流股中各组分浓度, kg 杂质 · (kg 流股)<sup>-1</sup>
- $s_y$ ——富流股中各组分浓度, kg 杂质 · (kg 流股)<sup>-1</sup>
- TAC——年度总费用, \$ · a<sup>-1</sup>
- TCC——总投资费用, \$
- $X$ ——贫流股中各组分浓度, kg 杂质 · (kg 流股)<sup>-1</sup>
- $x$ ——贫流股中各组分在每一级的浓度, kg 杂质 · (kg 流股)<sup>-1</sup>
- $Y$ ——富流股中各组分浓度, kg 杂质 · (kg 流股)<sup>-1</sup>
- $y$ ——富流股中各组分在每一级的浓度, kg 杂质 · (kg 流股)<sup>-1</sup>
- $\epsilon$ ——各传质平衡方程对应的浓度差, kg 杂质 · (kg 流股)<sup>-1</sup>

上角标

in——各流股在每一个传质单元进口处的参数

out——各流股在每一个传质单元出口处的参数

lim——流率或组分浓度的目标参数

下角标

- $E$ ——传质平衡方程的数目
- $i$ ——第  $i$  个富流股
- $j$ ——第  $j$  个贫流股
- $k$ ——第  $k$  个间隔
- $p$ ——第  $p$  个组分
- $R$ ——富流股的数目
- $S$ ——贫流股的数目

References

- [1] Mahmoud M El-Halwagi, Vasilios Manousiouthakis. Synthesis of mass exchange networks. *AIChE J.*, 1989, **35** (8): 1233-1244
- [2] Mahmoud M El-Halwagi, Vasilios Manousiouthakis. Automatic synthesis of mass exchange networks with single component targets. *Chemical Engineering Science*, 1990, **45** (9): 2813-2831
- [3] Hallale N, Fraser D M. Supertargeting for mass exchange networks ( I ): Targeting and design techniques. *Trans. IChemE*, 2000, **78** (Part A): 202-207
- [4] Bagajecic M J, Manousiouthakis V. On the mass/heat exchanger network representations of distillation networks. *AIChE J.*, 1992, **38**: 1769-1800
- [5] Douglas J M. Process synthesis for waste minimization. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 1992 (31): 238-243
- [6] Papalexandri K P, Pistikopoulos E N, Floudas A. Mass exchange networks for waste minimization; a simultaneous approach. *Trans. IChemE*, 1994, **72** (Part A): 279-294
- [7] Chen Cheng-Liang, Hung Ping-Sung. Simultaneous synthesis of mass exchange networks for waste minimization. *Computers and Chemical Engineering*, 2005, **29**: 1561-1576

- [8] Sztikai Z, Lelkes Z, Rev E, Fonyo Z. Handling of removable discontinuities in MINLP models for process synthesis problems, formulations of the Kremser equation. *Computers and Chemical Engineering*, 2002, **26**: 1501-1516
- [9] Hallale N, Fraser D M. Capital and total cost targets for mass exchange networks (Part 2): Detailed capital cost models. *Computers and Chemical Engineering*, 2000, **23**: 1661-1679
- [10] Yin Hongchao (尹洪超), Yuan Yi (袁一). An improved optimal synthesis method for non-split heat exchanger networks. *Journal of Chem. Eng. of Chinese Univ.* (高校化学工程学报), 1997 (1): 63-68
- [11] Ciric A R, Floudas C A. Heat exchanger synthesis without decomposition. *Computers and Chemical Engineering*, 1991, **15**: 385-396
- [12] Shivakumar K, Narasimhan S. A robust and efficient NLP formulation using graph theoretic principles for synthesis of heat exchanger networks. *Computers and Chemical Engineering*, 2002, **26**: 1517-1532
- [13] Xiao Wu (肖武). Large scale multi-stream heat exchanger network synthesis based on the stream effective temperature level [D]. Dalian: Dalian University of Technology, 2006
- [14] Li Shaojun (李绍军), Yang Yongrong (阳永荣). Mass exchange networks synthesis using genetic-alopex algorithms. *Journal of Chemical Industry and Engineering (China)*(化工学报), 2002, **53** (1): 60-65
- [15] Du Jian (都健), Wang Hongwei (王洪卫), Meng Xiaoqiong (孟小琼), Li Ying (李英), Du Hongbin (杜红彬), Fan Xishan (樊西山), Yao Pingjing (姚平经). Design of water utilization network with multiple contaminants based on adaptive simulated annealing genetic algorithm. *Computers and Applied Chemistry* (计算机与应用化学), 2004, **21** (1): 128-133
- [16] Hallale N. Capital cost targets for the optimum synthesis of mass exchange networks [D]. Cape Town: University of Cape Town, 1998
- [17] Sztikai Z, Farkas T, Lelkes Z, Rev E. Fairly linear mixed integer nonlinear programming model for the synthesis of mass exchange networks. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2006, **45**: 236-244