

基于粒子群优化算法的化工稳态流程模拟参数优化

朱春梦^{1,2}, 蓝兴英^{1,2*}

1 中国石油大学(北京)人工智能学院, 北京 102249

2 中国石油大学(北京)重质油国家重点实验室, 北京 102249

* 通信作者, Lanxy@cup.edu.cn

收稿日期: 2021-09-23

国家自然科学基金项目(91834303)支持

摘要 化工流程模拟已广泛应用于石油化工行业, 是工艺优化与辅助设计的主要手段。化工过程中工艺参数具有多样性和复杂性, 传统优化方法普遍针对少量的关键参数进行灵敏度分析并优化, 较难达到全局最优。因此, 本文提出了基于粒子群优化算法的化工工艺流程模拟操作参数优化方法。以天然气脱碳工艺过程为研究对象, 基于 Aspen HYSYS 的接口实现了流程模拟与优化算法之间的耦合, 结合工艺机理知识, 实现了基于粒子群优化算法的天然气脱碳稳态流程模拟操作参数的最优化。在产品满足工艺要求的条件下, 以最高脱碳率和最小装置运行成本为目标函数, 以对工艺有较大影响且可控的操作参数为决策变量, 对某 $5.8 \times 10^6 \text{ m}^3/\text{d}$ 天然气净化装置进行操作参数的优化。优化结果表明, 采用更少的吸收塔和再生塔塔板数即可满足酸性气体的脱除需求; 在保证每层塔板处于良好的操作状态的条件下, 降低再生塔回流比, 塔内的气液相负荷降低, 使得再沸器负荷降低; 降低贫胺液入吸收塔温度, 有利于增大 CO_2 与醇胺液反应的正向进行程度, 同时吸收推动力的增大会降低设备的腐蚀程度; 提高吸收塔压力, 塔内传质推动力增加, 使得气体净化效果有所提高。通过粒子群优化算法的天然气脱碳稳态流程模拟操作参数优化, 最终使净化气中二氧化碳含量从 $0.16 \text{ mol}\%$ 降低到 $0.05 \text{ mol}\%$, 同时每年能量消耗成本降低约 12.96% 。该方法在工艺流程模拟的基础上, 无需人为参与地快速自动找到全局最优操作方案, 可灵活推广到各种实际工业过程的流程优化中。

关键词 天然气脱碳; 稳态模拟; 粒子群优化算法; 智能优化; HYSYS 模拟

Optimization of chemical steady-state process simulation parameters based on a particle swarm optimization algorithm

ZHU Chunmeng^{1,2}, LAN Xingying^{1,2}

1 College of Artificial Intelligence, China University of Petroleum-Beijing, Beijing 102249, China

2 State Key Laboratory of Heavy Oil Processing, China University of Petroleum-Beijing, Beijing 102249, China

Abstract Chemical process simulation has been widely used in the petrochemical industry. This has been the main means of process optimization and aided design. The process parameters in a chemical process are diverse and complicated. It is difficult for traditional optimization methods to achieve global optimization by sensitivity analysis and optimization of a small number of key parameters. Therefore, an optimization method for simulating operating parameters of chemical processes based on

引用格式: 朱春梦, 蓝兴英. 基于粒子群优化算法的化工稳态流程模拟参数优化. 石油科学通报, 2022, 01: 50-60

ZHU Chunmeng, LAN Xingying. Optimization of chemical steady-state process simulation parameters based on a particle swarm optimization algorithm. Petroleum Science Bulletin, 2022, 01: 50-60. doi: 10.3969/j.issn.2096-1693.2022.01.005

particle swarm optimization algorithm is proposed in the present paper. The natural gas decarbonization process is chosen as the research object, the process simulation and optimization algorithm are coupled using Aspen HYSYS software. Combined with the knowledge of the process mechanism, the optimization of operation parameters of the natural gas decarbonization steady-state process simulation based on a particle swarm optimization algorithm has been achieved. Under the condition that the product meets the process requirements, and the controllable operation parameters that have a great influence on the process are used as the decision variables, the operation parameters of a 5.8×10^6 m³/d natural gas purification unit are optimized by taking the maximum decarbonization rate, the minimum operation cost of the unit as the objective function. The optimization results show that fewer plates in the absorption tower and regeneration tower can meet the needs of acid gas removal requirements. Under the condition that the each tray is in a good operating state, the reflux ratio of the regeneration tower is reduced compared with the original process, and the gas-liquid phase load is also reduced to a certain extent, resulting in a decrease of the reboiler load. The temperature of the lean amine liquid into the absorption tower is lower than the original process, so that the positive reaction degree of CO₂ with the alcohol amine liquid is increased, and the increased absorption driving force slows down the corrosion of the equipment. The pressure in the absorption tower is increased compared with the original process, which increases the mass transfer driving force in the tower and the purification of the gas. Based on the particle swarm optimization algorithm for the natural gas decarbonization process, the carbon dioxide content in the purified gas is reduced from 0.16 mol% to 0.05 mol%, and the annual energy consumption cost is reduced by about 13%. The method proposed in the present work can find the global optimal operation scheme quickly and automatically without human involvement, and can be flexibly extended to the process optimization of various industrial processes.

Keywords natural gas decarbonization; steady-state simulation; particle swarm optimization algorithm; intelligent optimization; HYSYS simulation

doi: 10.3969/j.issn.2096-1693.2022.01.005

0 引言

化工流程模拟软件目前已广泛应用于石油化工行业。通过流程模拟手段对工艺过程中的操作参数进行数值调整,寻找最佳工艺条件,从而达到节能、降耗、增效的目的^[1]。然而流程模拟中操作参数具有多样性和复杂性,体现在每一个操作单元都有其对应的操作参数,且多个操作单元之间互相影响,人们多基于工艺机理知识和经验给定操作参数数值,或者对几个关键操作参数进行灵敏度分析寻优,此方法耗费了大量的时间成本,且无法确定所选取的操作参数数值为最佳数值,仅获得一种能够达到较好工艺效果的操作方案^[2-4]。

通过优化算法来获得最佳操作参数是近年来一个非常有前景的研究方向。传统优化算法虽然能够较好解决结构化问题以及单极值问题,但面对复杂的化工过程,具有普适问题描述,能够找到全局最优以及能够较好解决多极值问题等优势启发式智能算法受到了学者们的广泛关注,其中熊俊文等^[5]利用遗传算法实现了催化裂化分馏塔操作参数的最优化设置,保证了分馏塔重石脑油流量和轻柴油流量的同时最优;王珊珊等^[6]介绍了基于约束骨干粒子群算法的化工过程动态多目标优化问题,并将其应用到解决间歇反应器的优化问题中,指出该方法可通过结合偏好等信息控制冷却剂的流率来最大化主产物浓度和最小化副产物

浓度;也有学者对智能算法的结构进行了改进^[7-8],以更简单、更通用、便于并行处理等特点,使之更适用于具体的化工过程。

受宏观经济增长、环保政策推进等因素的拉动,未来几年全球天然气需求将保持1.5%到2.0%的增速持续增涨^[9]。随着“碳达峰”和“碳中和”概念在《巴黎协定》中的提出,各国纷纷做出响应以应对全球气候变化问题,目标使全球温升保持在2℃甚至1.5℃以内的水平^[10],因此天然气中CO₂的脱除问题获得了学者们的极大关注^[11-12]。常用于高进料量、中低二氧化碳含量、高脱碳率以及甲烷含量损失小的醇胺法脱碳工艺已被广泛应用于化工领域。学者们多通过流程模拟手段对工艺过程中的操作参数进行数值调整,寻找最佳工艺条件,其中常学煜等^[13]利用流程模拟软件对醇胺法脱酸工艺流程进行了参数优化分析,使得流程总能耗较优化前降低18.84%;刘卜玮等^[14]采用Aspen HYSYS软件搭建了脱碳工艺流程并建立了系统能耗计算模型,优化后系统总能耗降低了2.4%。遗传算法和粒子群优化算法是两个化工领域经常应用并取得了较好效果的智能算法,相比遗传算法,粒子群优化算法^[15]省略了复杂的选择、交叉、变异的计算过程,具有简单的结构和易于实现、不需要借助问题特征进行信息描述的特点,将其与流程模拟结合实现醇胺法脱碳工艺的降本增效可行性更高。因此本文以天然气脱碳工艺过程为研究对象,根据数据对象接口

技术利用Python脚本语言开发了Aspen HYSYS与粒子群优化算法之间的接口程序,在采用Aspen HYSYS流程模拟软件对其进行稳态流程模拟的基础上,结合粒子群优化算法进行工艺过程操作参数数值的优化选取,进而获得了一种最优的工艺操作方案,并基于数据库实现了装置稳定运行时异常操作的重新优化。在产品满足工艺要求的条件下,以最高脱碳率和最小装置用能为目标函数,以对工艺有较大影响且可控的操作参数为决策变量,对某 $5.8 \times 10^6 \text{ m}^3/\text{d}$ 天然气净化装置实行了操作参数的最优化。

1 基于智能算法的流程模拟参数优化方法

将流程模拟软件与智能算法相融合对化工生产的

挖潜改造、节能增效、生产指导具有重大意义。本文提出的基于智能算法的化工稳态流程模拟操作参数优化方法主要有两大操作步骤:一方面先利用流程模拟软件搭建合理的工艺流程,再利用数据对象接口技术开发流程模拟软件与智能算法之间的接口程序,通过智能算法选取最佳操作参数数值;另一方面结合数据库将流程模拟收敛的关键过程变量数据进行存储,以便进行模拟效果的验证以及异常操作后的重新优化。整体架构如图1所示,具体操作步骤如下:

(1)选用合适的流程模拟软件搭建相应的化工工艺流程,给定各操作单元操作参数的初始值,使流程模拟收敛,获得初步工艺流程。

(2)依据工艺机理分析工艺过程,根据具体需求,为智能算法构建合理的单目标或多目标函数,选取合

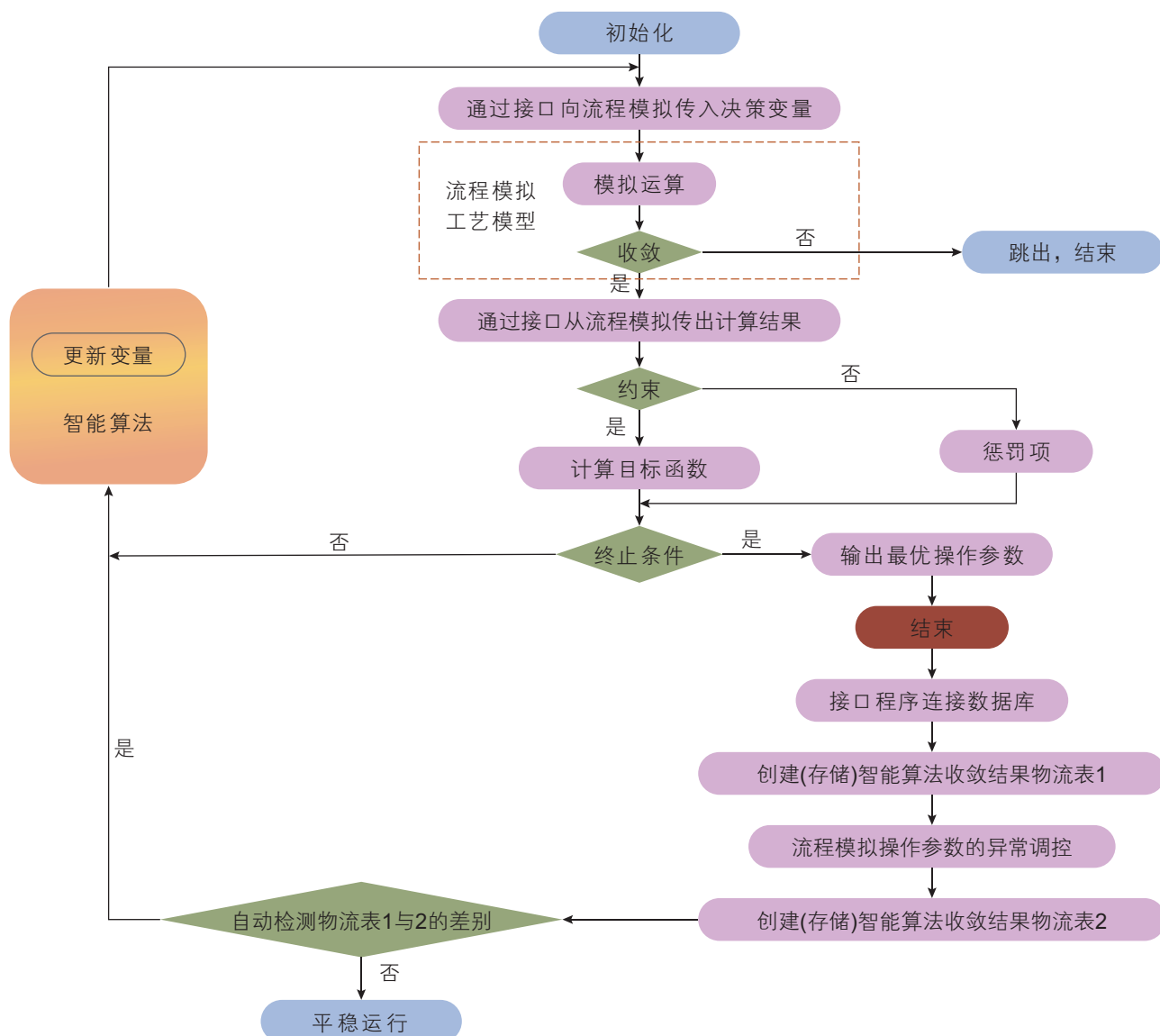


图1 基于智能算法的稳态流程模拟参数优化方法图

Fig. 1 Diagram of optimization method for steady-state process simulation parameters based on intelligent algorithms

适的决策变量,即选择合理的操作参数作为变量进行优化,添加适宜的等式及不等式约束条件。

(3)随机初始化或根据已建立的模拟流程中给定的操作参数作为初值,构建初始数据集。如若采用随机初始化数据集的方式,则将随机结果通过接口程序传入流程模拟软件,若流程模拟软件计算收敛,进入步骤4;若未收敛,结束程序,再一次执行初始化数据集操作。如若采用步骤1,即操作人员自行建立流程模拟,使之收敛后直接进入步骤4。

(4)流程模拟收敛后,利用接口程序将步骤2中建立的智能算法模型所需的参数数据从流程模拟软件传入智能算法。

(5)判断收敛的流程模拟是否满足物料平衡、动量平衡和能量平衡等化工机理层面的等式约束以及评价标准、能耗分析、设备大小等公用工程上的不等式约束,而后进入智能算法计算阶段。

(6)若满足步骤5的约束,再根据目标函数进行计算,进入步骤7;若未满足步骤5的约束,则根据智能算法及工艺机理确定的惩罚项进行约束惩罚,而后进入步骤7。

(7)判断根据目标函数或惩罚项进行约束规范后计算出的结果是否满足此工艺操作方案的要求。

(8)若步骤7的结果满足工艺操作方案要求,将结果输出,至此,我们找到了一种能够达到最佳优化效果的工艺操作方案;若未达到要求,重新调用智能算法,利用智能算法对决策变量进行惩罚约束更改后再次传入流程模拟,回到步骤3。

(9)采用最佳操作参数的流程模拟稳定运行时,对数据库进行设置,创建用户名、密码、子协议和驱动程序等信息,利用接口程序与数据库搭建连接,通过接口程序向数据库发送连接请求,如若成功,返回一个数据库连接。

(10)程序端数据库操作,数据库端执行接口语言指令,根据操作选择不同的执行方法,ExecuteQuery、Replace into、Commit和Execute分别执行查询、替换、内存到数据库的数据提交、多个结果集的返回操作,继而读取流程模拟中关键过程变量的数据,存储到所建立的数据表1中,综合考虑数据查询需求以及内存需求等建立相应的数据库主键。

(11)调整流程模拟中操作参数的数值(模拟异常操作的出现),流程模拟软件端重新进行收敛运算。

(12)接口程序感知模拟收敛后,通过程序端数据库操作,建立与数据表1格式相同的数据表2,将此时关键过程变量的数据传入数据库,进行数据存储。

(13)数据库结果返回,主要分为更新操作,查询操作和程序端数据库数据表对比操作,分别对应返回操作产生影响的记录数据,返回已选择的数据集对象和检查两表存在的差异。若无差异,流程模拟仍平稳运行;若有差异,再次调用智能算法,重新优化流程模拟中的操作参数,稳定运行时再次回到步骤10。

2 基于粒子群优化算法的天然气脱碳稳态流程模拟参数优化

2.1 天然气脱碳稳态流程模拟

本文以天然气脱碳过程为具体工艺过程,构建基于智能算法的稳态流程模拟参数优化模型。首先在Aspen HYSYS中搭建模拟流程,为智能算法调优提供基础。以某 $5.8 \times 10^6 \text{ m}^3/\text{d}$ (体积基准为 20°C 、 101.325 kPa)天然气净化装置为研究对象,该装置年生产时间330天,原料气压力 9.1 MPa ,温度 55°C 。原料气具体组分组成见表1。使用甲基二乙醇胺(MDEA)水溶液(51.99 wt%)脱除天然气中的酸性气体(硫化氢和二氧化碳),使用Aspen HYSYS软件中的酸性气体-化学溶剂物性包作为本设计的物性方法。采用Aspen HYSYS中多种类别的模块来模拟对应的工业设备或单元操作,具体的模块选择见表2。

天然气脱碳稳态模拟流程如图2所示,主要包含吸收、闪蒸、换热和汽提4大部分。原料气B1在 55°C 、 9.1 MPa(g) 的条件下进入本装置,经过进口分离器V1脱除气体中可能携带的小固体颗粒和液滴后进入吸收塔T1的底部。塔内含酸性气体的天然气自下而上与来自吸收塔T1顶部的MDEA贫液逆流接触,气体中绝大部分的 H_2S 和 CO_2 被胺液吸收脱除。湿净化气B17从吸收塔T1顶部离开,吸收了酸气的富胺液B4(6.3 MPa(g) 、 74.51°C)从吸收塔T1底部抽出后

表1 原料气组分组成

Table 1 Composition of feed gas

组分	摩尔含量/%	组分	摩尔含量/%
H_2S	4.4821	i-C ₄ H ₁₀	0.0598
CO_2	6.1817	i-C ₃ H ₁₂	0.0298
H_2O	0.2105	n-C ₆ H ₁₄	0.0890
CH_4	87.1909	n-C ₇ ⁺	0.0907
C_2H_6	1.2267	N_2	0.2993
C_3H_8	0.1395		
合计	100		

表2 单元模块的选择

Table 2 Selection of unit model

设备或操作	HYSYS 模块
分离器	分离器
填料吸收塔	吸收塔
降压阀	控制阀
闪蒸罐	分离器
贫/富液热交换器	换热器
再生塔	精馏塔模块
胺液混合器	混合器
胺液循环泵	泵
贫液空冷器	冷却器
胺液循环	循环逻辑模块
塔顶回流循环	循环逻辑模块
调节参数	设置逻辑模块

经过减压阀F1, 压力降至约 0.87 MPa(g)后进入闪蒸罐V1, 闪蒸出部分溶解的烃类气体。从闪蒸罐底部抽出的富胺液B7经贫/富液换热器E1与再生塔T2塔底来的贫胺液换热, 温度升至约 89.3 °C后进入再生塔第1块塔板后自上而下流动, 与塔内自下而上的蒸汽逆流接触, 上升的蒸汽汽提出富胺液中的H₂S、CO₂气体。再生热量由再生塔再沸器提供。热贫胺液B10(108.0 °C)自再生塔底部引出, 先经贫/富液换热器E1

与富胺液换热至 84.57 °C左右, 经过贫液空冷器E2, 冷至约 41.65 °C送至低压贫液泵P1, 升压后进入吸收塔T1循环使用。由于本装置用水不平衡, 需向系统不断补充水, 以维持溶液浓度, 利用混合器M1将物流B11和水B12在等压下混合。

关键过程变量的Aspen HYSYS模拟值与装置当前仪表显示的实际值见表3。通过数据对比可知, 关键组分与流量的模拟数据与实际数据较为接近, 可认为在HYSYS中搭建的模拟工艺过程足够准确, 能够在一定程度上反应实际情况, 为下文在此流程模拟基础上建立的基于粒子群优化算法的天然气脱碳稳态流程模拟操作参数的优化提供了可靠的基础。

2.2 粒子群优化算法

本文采用全局最佳粒子优化方案^[16], 即每个粒子都被其他成员找到的最佳解决方案所吸引, 这种结构类似于一个完全连接的社交网络, 最终跨越种群中所有粒子得到一个最佳解决方案。粒子群优化算法流程如图3所示。(1)算法初始化, 设定迭代次数阈值为50, swarm_size(粒子种群数)为20, variables(变量数)为5, 设定粒子初始速度值为0, 限制粒子绝对最大速度值为5, 根据公式1设定粒子初始位置, 粒子位置上下界(u 和 l)见表4; (2)根据目标函数评估每个粒子的函数适应值, 得到粒子的个体极值; (3)根据粒子

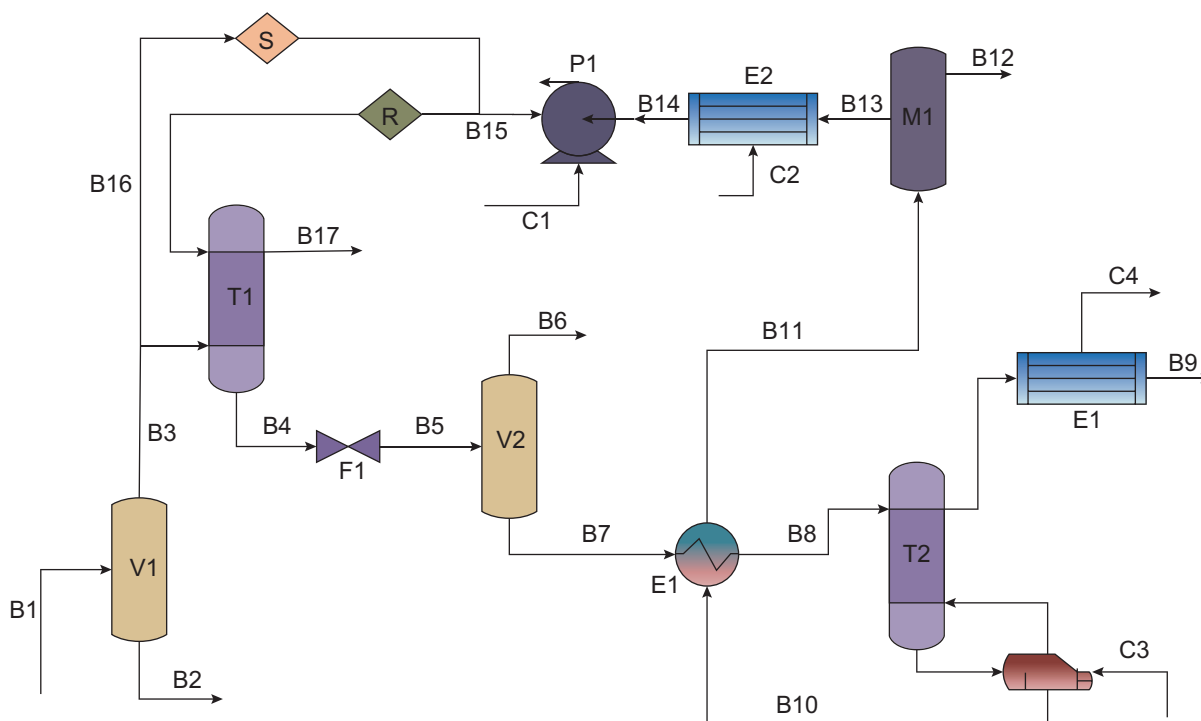


图2 天然气脱碳稳态流程模拟图

Fig. 2 Simulation diagram of steady-state process of natural gas decarbonization

表 3 实际数据与模拟数据过程变量对比

Table 3 Comparison of process variables between actual data and simulated data

过程变量	实际数据	模拟数据	误差 /%
净化气流率 /kmol·h ⁻¹	9213.13	9113.00	-1.09
净化气中 H ₂ S 含量 /ppm	<5	4.523	\
净化气中 CO ₂ 含量 /mol%	0.16	0.16	0.00
酸气流率 /kmol·h ⁻¹	1097.20	1097.00	-0.02
富胺液出吸收塔流率 /kmol·h ⁻¹	17 263.60	17 260.24	-0.02
富胺液至再生塔流率 /kmol·h ⁻¹	17 902.90	17 215.16	-3.84
贫胺液出再生塔流率 /kmol·h ⁻¹	16 799.40	16 118.16	-4.06

个体极值寻找全局最优解，速度更新公式如式 2 所示。优化参数含有连续与离散两种变量，离散变量的位置同连续变量根据公式 3 更新后进行整数舍入。

$$X'_{i,d} = \frac{1}{(u-l) \times \text{random}(\text{variables}, \text{swarm_size})} \quad (1)$$

$$V_{i,d} = kV_{i,d} + K_1 \text{random}(1, \text{variables}) (P_{i,d} - X'_{i,d}) + K_2 \text{random}(1, \text{variables}) (G_{i,d} - X'_{i,d}) \quad (2)$$

$$X'_{i,d} = X'_{i,d} + V_{i,d} \quad (3)$$

在一个 d 维搜索空间中， k 称为惯性影响因子， $k=0.72$ ； K_1 和 K_2 称为搜索过程中速度的加速常数， $K_1=K_2=1.49$ 。 $P_{i,d}$ 表示维数为 d 维时变量 i 的个体极值， $G_{i,d}$ 表示维数为 d 维时变量 i 的全局最优解，本文 $d=1$ ；(4) 根据全局最优解，更新每个粒子的历史最优位置，进而更新群体的全局最优位置；(5) 当迭代次数达到设定阈值或根据 2-范数计算的个体极值与全局最优值差距小于 10^{-5} 时，寻优结束；否则重新评估粒子的函数适应值，回到步骤 2。实验结果表明，当迭代次数达到设定阈值时已经平稳收敛且损失值达到 10^{-5} ，优化效果满足流程需求。

2.3 粒子群优化算法与天然气脱碳稳态流程模拟的融合

本文采用 Aspen HYSYS 流程模拟软件对天然气脱碳工艺过程进行稳态模拟，基于对象接口技术利用

表 4 粒子位置的最大值与最小值数据

Table 4 The maximum and minimum data for particle position

优化参数	上界	下界
吸收塔塔板数	30	20
再生塔塔板数	30	20
贫胺液入吸收塔温度 /°C	45	30
吸收塔底部塔板压力 /kPa	8800	6500
再生塔回流比	4.0	3.0

Python 脚本语言将 Aspen HYSYS 与粒子群优化算法相连^[17]，实现了 Aspen HYSYS 与粒子群优化算法之间数据的双向传递^[18]，结合 SQLite 数据库操作实现了模拟稳态运行时的数据存储和异常操作后的重新调优，从天然气二氧化碳脱除率和装置整体运行成本两个方面

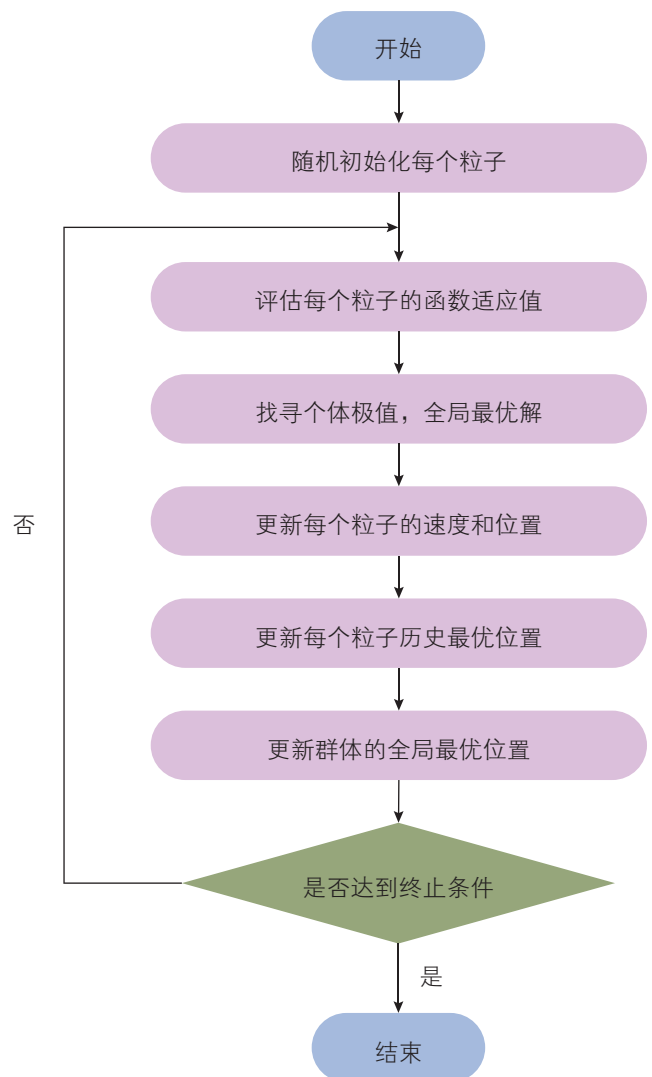


图 3 粒子群优化算法流程图

Fig. 3 Flow chart of particle swarm optimization algorithm

综合评价装置操作参数选取的优劣,最终实现了基于粒子群优化算法的天然气脱碳稳态流程模拟操作参数的最优化。

2.3.1 决策变量

工艺流程中的设计参数,如塔板数,和操作参数,如温度、压力等,均会对最终结果产生影响,本文提出的方法既可以实现对设计参数进行优化,也可以对操作参数进行优化。在天然气脱碳工艺过程中,吸收塔塔板数影响着塔的设计成本,塔板数增加,塔装置设计成本增加,但随塔板数的增加,酸气的脱除会更加彻底,因此要综合考虑酸气脱除和固定投资的均衡来选择吸收塔塔板数。与吸收塔类似,再生塔塔板数的选择要综合考虑再生效果和固定投资的均衡。因此本文优化的设计参数为吸收塔和再生塔的塔板数。如图1所示,程序找到合适的塔板数,模拟流程收敛后,通过粒子群优化算法对操作参数进行优化。粒子群优化算法的决策变量为贫胺液入吸收塔温度、吸收塔顶部塔板压力、再生塔回流比。

(1) 贫胺液入吸收塔温度

综合考虑原料气和再生塔循环胺液的影响来确定贫胺液入吸收塔温度。 CO_2 与醇胺液的反应属于假一级可逆反应,总反应见式4:



从反应动力学和传质角度出发,温度越高反应速度越快,并且随着温度升高溶液粘度会降低,更有利于传质。但伴随反应温度的升高,设备腐蚀加剧,此外,该反应为放热反应,提高温度使得反应平衡常数减小,反应正向进行程度减小。一般温度越低,可溶组分的溶解度越高,溶质的平衡分压减小,吸收推动力增大,完成规定的分离任务需要比高温下操作更小的液气比,或更少的塔板数。因此需要平衡多方因素选择适宜的贫胺液入吸收塔温度。

(2) 吸收塔底部塔板压力

吸收塔内压力升高,会增加酸性气体组分的分压,气体分压的增高有助于增大传质推动力,提高气体净化效果,但同时会影响净化气的流量。吸收塔的压力和进料的压力有着紧密的联系,入口原料气压力升高或吸收塔内压力升高,都会使得酸性气体分压增大,但吸收塔压力高于原料气时需要增加原料天然气压缩功,进而提高能耗,因此需要平衡传质推动力,净化气的流量和能耗的影响选择适宜的吸收塔底部塔板压力。单机压缩机绝热功率 W_{gas} ,单位“kW”,计算^[19]见式5:

$$W_{\text{gas}} = \frac{1}{1000} \cdot P_1 \cdot V_n \cdot n \cdot \frac{A}{A-1} \cdot \left[\left(\frac{P_2'}{P_1'} \right)^{\frac{A-1}{A}} - 1 \right] \quad (5)$$

式中, P_1 为压缩机入口处天然气压力, P_1' 和 P_2' 分别为压缩机入口处和出口处天然气的绝对压力,单位“MPa”, V_n 为压缩机排气量,单位“ $\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ ”, A 为压缩机绝热指数,值取1.32, n 为压缩机转速,单位“ $\text{r} \cdot \text{min}^{-1}$ ”。压缩机实际轴功率为摩擦耗功、风扇耗功和绝热功率之和,为简化计算,功率消耗按压缩机绝热功率计算。

(3) 再生塔回流比

醇胺法脱碳工艺中再生塔回流比对富胺液再生程度影响较大,随着回流比的增大,回流量会增大,再生塔塔内的气液相负荷也会随之增加,导致冷凝器和再沸器负荷皆升高,而再生贫胺液的酸气负荷会降低, CO_2 和 H_2S 几乎全部进入塔顶酸气中。当回流比增至一定程度后贫胺液酸气负荷会保持稳定,因此回流比也具有最优值。

2.3.2 目标函数

考虑工艺需求和装置整体运行成本,从最高脱碳率和最小装置运行成本两方面建立了多目标函数。工程总投入 Z_{capital} 分为固定资本 $C_{\text{fixed},i}$ 和可变资本 $C_{\text{variable},i}$,即 $Z_{\text{capital}} = \sum (C_{\text{fixed},i} + C_{\text{variable},i})$,大多数持续运行的工厂,固定资本往往不会改变,需要优化的为可变资本,可变资本公式如式6所示:

$$C_{\text{variable}} = P_{\text{feed}} \times M_{\text{feed}} + p \times W_{\text{compressor}} \quad (6)$$

式中, M_{feed} , p 均为价格因子,优化时为定值,实际天然气脱碳工艺过程中, P_{feed} 进料也为定值。因此,可变资本的优化转化为装置用能成本 $W_{\text{compressor}}$ 的优化。天然气脱碳工艺过程中含两个能量汲取点,泵用能 E_1 和再生塔用能 E_2 ,当吸收塔底部塔板压力大于原料气进口压力时,增加额外的天然气压缩功 E_3 ,因此选用 E_1 、 E_2 和 E_3 之和 Energy 最小为目标函数,单位“ $\text{kJ} \cdot \text{h}^{-1}$ ”,最终多目标优化描述如式7所示:

$$\begin{aligned} \max(\text{profit}(x)) &= \sum_{i=1}^5 \text{CO}_2(i)x(i) \\ \min(\text{Energy}) &= E_1 + E_2 + E_3 \end{aligned} \quad (7)$$

多目标粒子群优化算法采用权重加全求和的方法进行求解,使得多目标问题单目标化,如公式8,不同的权值赋予获得Pareto解集。优化目标中二氧化碳含量变化范围的数量级远小于装置能耗,简单的随机权重分配会让算法过度优化整体流程的能量消耗而使脱碳率达不到标准。本文采用最大最小归一化方法,

如公式 9，使得两目标完成数量级上的匹配，从而进行优化，其中 m_i 代表目标函数中的 $profit(x)$ 和 $Energy$ ， u 和 l 分别对应其上下限，其中 $Energy$ 的 $u=3.2 \times 10^8$ ， $l=2.4 \times 10^8$ ； $profit(x)$ 的 $u=0.03$ ， $l=0$ 。本文优化时采用 $w_1=0.7$ ， $w_2=0.3$ 的权值分配。

$$\min F(m_1, m_2) = w_1 \cdot Energy + w_2 \cdot profit(x) \quad (8)$$

$$m'_i = \frac{m_i - l}{u - l} \quad (9)$$

相应的经济模型如公式 10 所示，符号说明见表 5：

$$W_{\text{compressor}} = Q \times R \times H + M \times N \times H + C + W_{\text{gas}} \times N \times H \quad (10)$$

2.3.3 模拟与优化结果

使用 2.1 中搭建的工艺模拟流程框架，保持原料气组成和处理量不变，使用本文构建的基于智能算法的化工稳态流程模拟参数优化方法对工艺过程参数进行优化。本文采用的全局最佳粒子群优化算法，粒子种群数 20，2 个连续变量，3 个离散变量，迭代

10 次左右时全局最佳粒子和个体粒子的值已十分接近，如图 4 所示， $y\text{-gbest}$ 代表全局最佳粒子的寻优曲线， $y\text{-pbest}$ 代表个体粒子的寻优曲线。基于粒子群优化算法优化后的模拟结果与原稳态流程的模拟结果中关键过程变量的对比见表 6。本文搭建的基于智能算法的化工稳态流程模拟参数优化方法能够在不依赖操作人员的情况下快速找到全局最优操作方案，模拟结果表明，净化气中二氧化碳含量从 0.16 mol% 降低到 0.05 mol%，同时能量消耗成本年降低约 12.96%，比 2.1 中的工艺模拟流程效果更优。模拟优化结果表明，更少的吸收塔和再生塔塔板数即可满足酸性气体的脱除需求。

经过优化后的再生塔回流比相对于实际装置由 3.7 降至 3.0，随着回流比的减小，回流量减小，再生塔塔内的气液相负荷较原模拟流程也有一定程度的减少，导致再沸器负荷有所降低。本文选用浮阀塔板，4 个矩形降液管，对回流比降低后精馏塔的第 4 块塔板

表 5 经济模型的符号说明

Table 5 Symbolic description of economic model

符号	数值	意义	来源
M	变量	泵功率	HYSYS 接口传出
Q	变量	再生塔中再沸器的耗热量	HYSYS 接口传出
W_{gas}	变量	压缩机天然气压缩功	HYSYS 接口传出
R	4.78×10^{-9} 万元/kJ	热力价格	常数
N	5.5×10^{-5} 万元/kW·h	电力价格	常数
H	7920 h	装置年均运行时间	常数
C	20 万元	整体装置操作维修费用	常数

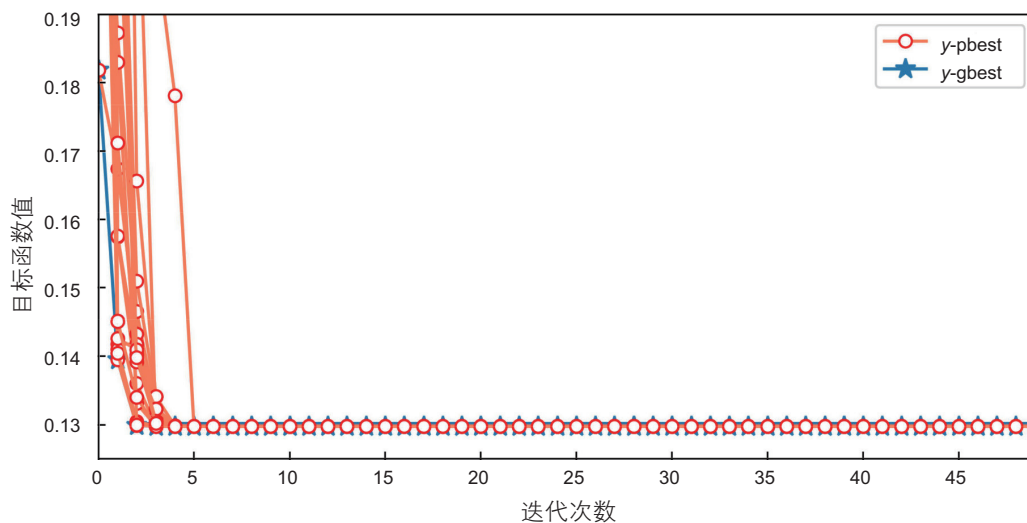


图 4 优化过程中 PSO 算法种群粒子目标函数值随迭代次数变化图

Fig. 4 Variation of PSO algorithm objective function with iteration times in the optimization process

(由上往下)进行了水力学核算,智能算法优化前后数据对比如表7所示。结果表明,塔板泛液率升高,塔板上液层变厚,使得塔板压降升高。塔板总压降升高,会使得气体通过塔板的速度增大,上升气体通过开孔处的阻力和克服液体表面张力所形成的压降能够更好地抵消塔板上液层的重力,漏液现象发生的可能性将会降低。但总压降的升高会增大塔板的放大效应,即塔的操作性能会有所降低,同时体系的相对挥发度和降液管的液相处理能力也会有所下降,雾沫夹带和喷射泛液现象发生的可能性将会升高,但压降变化幅度较小,不足以使气体在液层中的气泡形式发生较大改变。回流比降低后,降液管中液体流速降低,液体在降液管中的停留时间增多,使被液体夹带进入降液管中的气泡更多的被释出同时降液管中的液面仍超过堰上高度,没有阻碍液体在降液管中的正常下流。在塔的实际

表6 智能算法优化前后过程变量对比

Table 6 Comparison of process variables before and after intelligent algorithm optimization

项目	实际数据	优化数据
再沸器能耗/ $\text{kJ}\cdot\text{h}^{-1}$	2.821×10^8	2.431×10^8
泵能耗/ $\text{kJ}\cdot\text{h}^{-1}$	6.024×10^6	5.982×10^6
泵功率/ kW	1673	1662
贫胺液循环量/ $\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1}$	1.615×10^4	1.615×10^4
净化气流量/ $\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1}$	9113	9094
贫胺液入吸收塔温度/ $^{\circ}\text{C}$	43	30
吸收塔底部塔板压力/ kPa	6300	7851
补给水用量/ $\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1}$	33.16	5.78
吸收塔塔板数	28	23
再生塔塔板数	24	19
再生塔回流比	3.7	3.0
净化气中 CO_2 含量/ $\text{mol}\%$	0.16	0.05
净化气中 H_2S 含量/ ppm	4.523	1.484
装置总能耗/ $\text{kJ}\cdot\text{h}^{-1}$	2.88×10^8	2.49×10^8
能量消耗/ $\text{万}\cdot\text{年}^{-1}$	11 428.69	9947.15

表7 智能算法优化前后第4块精馏塔板水力学数据对比

Table 7 Comparison of hydraulic data of the 4th distillation column plate before and after intelligent algorithm optimization

项目	优化前	优化后
液泛率/ $\%$	79.78	79.89
降液管持液量(已充气)/ m	0.3263	0.3306
堰上高度(已充气)/ m	0.2049	0.2117
塔板总压降/ mbar	13.91	13.95
中部降液管液体流速/ $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$	0.096 25	0.096 23
塔板间距/ m	0.6096	0.6096

际操作中,气液负荷时常是有变化的,但要维持在一定的范围内,使得塔板具有适宜的工作区,如图5、6所示。核算结果表明,优化后的回流比能够保证每层塔板处于良好的操作状态。

贫胺液入吸收塔温度由 43°C 降到 30°C ,同时产品在满足工艺要求的条件下, CO_2 塔板数由28块降到了23块。实验结果表明,贫胺液入吸收塔温度降低,使得 CO_2 与醇胺液反应正向进行程度增大,吸收推动力变大,从某种程度上也减轻了设备的腐蚀程度。

吸收塔底部塔板压力由 6.3MPa 升至 7.8MPa ,净化气流量从 $9113\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1}$ 降至 $9094\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1}$,净化气中 CO_2 含量由 $0.16\text{mol}\%$ 降至 $0.05\text{mol}\%$ 。实验结果表明,吸收塔压力的升高增加了传质推动力,但同时

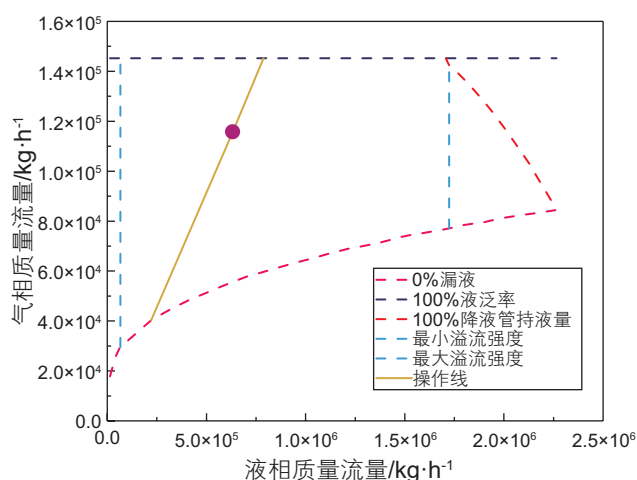


图5 优化操作前第4块精馏塔板液相与气相质量流量图

Fig. 5 Mass flow diagram of the liquid phase and vapor phase of the 4th distillation column plate before optimization operation

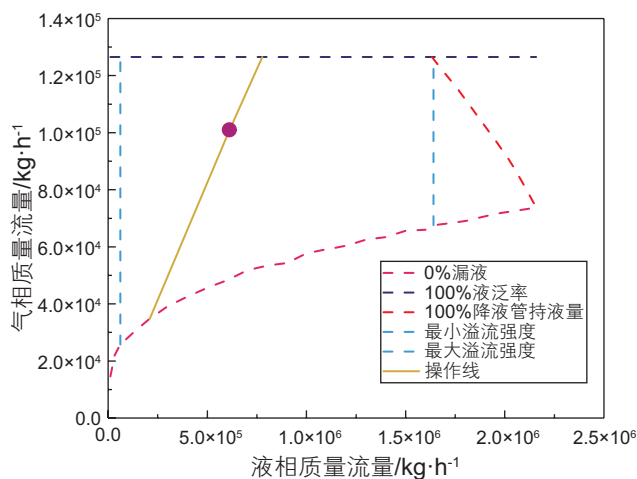


图6 优化操作后第4块精馏塔板液相与气相质量流量图

Fig. 6 Mass flow diagram of the liquid phase and vapor phase of the 4th distillation column plate after optimization operation

也减小了净化气流量。优化后的吸收塔底部塔板压力未超出天然气进塔的入口压力,节省了压缩天然气的功率消耗。

3 结论

(1)本文针对化工过程工艺参数难以达到全局最优的问题,将流程模拟技术与智能算法进行耦合,提出了一种基于智能算法的化工工艺过程模拟参数优化方法。具体实施方式为,一方面先利用流程模拟软件搭建合理的工艺流程,再利用数据对象接口技术开发流程模拟软件与智能算法之间的接口程序,通过智能算法选取最佳操作参数;另一方面结合数据库将流程模

拟收敛的物流数据进行存储,以便进行模拟效果验证以及异常操作后的重新优化。

(2)以天然气脱碳工艺过程为研究对象,以最高脱碳率和最小装置运行成本为目标函数,以对工艺有较大影响且可控的操作参数为决策变量,对某 $5.80 \times 10^6 \text{ m}^3/\text{d}$ 天然气净化装置进行了操作参数的优化。模拟结果表明,通过调整吸收塔和再生塔塔板数,降低贫液入吸收塔温度和再生塔回流比,提高吸收塔底部塔板压力,使得净化气中二氧化碳含量从 $0.16 \text{ mol}\%$ 降低到 $0.05 \text{ mol}\%$,同时每年能量消耗成本降低约 12.96% 。本优化方法无需人为参与地快速自动找到全局最优操作方案,可灵活推广到各种实际工业过程的流程优化。

参考文献

- [1] 李睿,胡翔. 化工流程模拟技术研究进展[J]. 化工进展, 2014, 33(S1): 27-31. [LI R, HU X. Research progress of chemical process simulation technology[J]. Chemical Industry and Engineering Progress, 2014, 33(S1): 27-31.]
- [2] 姚月华,陈晏杰,张香平,等. 原油常减压蒸馏装置的流程模拟及参数优化[J]. 过程工程学报, 2011, 11(03): 405-413. [YAO Y H, CHEN Y J, ZHANG X P, et al. Simulation of flow sheet and optimization of operational parameters on atmospheric and vacuum distillation units for crude oil[J]. The Chinese Journal of Process Engineering, 2011, 11(03): 405-413.]
- [3] 叶启亮,罗静,李玉安,等. 醋酸乙烯精制工艺的流程模拟与优化[J]. 现代化工, 2017, 37(05): 197-200. [YE Q L, LUO J, LI Y A, et al. Process simulation and optimization of vinyl acetate refining process[J]. Modern Chemical Industry, 2017, 37(05): 197-200.]
- [4] 赵晓军,陈伟军,杨敬一,等. 用ASPEN PLUS软件模拟优化卡宾达原油常压蒸馏的研究[J]. 炼油技术与工程, 2005, (11): 51-56. [ZHAO X J, CHEN W J, YANG J Y, et al. Simulation and optimization of atmospheric distillation unit processing cabinda crude with ASPEN PLUS software[J]. Petroleum Refinery Engineering, 2005, (11): 51-56.]
- [5] 熊俊文,吕翠英. 催化裂化分馏塔多目标遗传算法优化[J]. 计算机与应用化学, 2006, (05): 462-464. [XIONG J W, LV C Y. Catalyzing & cracking fractionation tower multi-objective genetic algorithm optimization[J]. Computers and Applied Chemistry, 2006, (05): 462-464.]
- [6] 王珊珊,杜文莉,陈旭,等. 基于约束骨干粒子群算法的化工过程动态多目标优化[J]. 华东理工大学学报(自然科学版), 2014, 40(04): 449-457. [WANG S S, DU W L, CHEN X, et al. Dynamic multi-objective optimization of chemical processes using constrained bare-bones MOPSO algorithm[J]. Journal of East China University of Science and Technology (Natural Science Edition), 2014, 40(04): 449-457.]
- [7] 邓毅,江青曹,曹志凯,等. 改进的粒子群算法在化工过程优化中的应用[J]. 计算机与应用化学, 2011, 28(6): 745-748. [DENG Y, JIANG Q Y, CAO Z K, et al. An improved adaptive particle swarm optimization algorithm and its application in the optimization of chemical process[J]. Computers and Applied Chemistry, 2011, 28(6): 745-748.]
- [8] 耿志强,毕帅,王尊,等. 基于改进NSGA-II算法的乙烯裂解炉操作优化[J]. 化工学报, 2020, 71(03): 1088-1094. [GENG Z Q, BI S, WANG Z, et al. Operation optimization of ethylene cracking furnace based on improved NSGA-II algorithm[J]. CIESC Journal, 2020, 71(03): 1088-1094.]
- [9] 白桦. 国际天然气市场五年回顾与展望[J]. 国际石油经济, 2021, 29(06): 71-77. [BAI H. Review of international natural gas market over the past five years and its prospect[J]. International Petroleum Economics, 2021, 29(06): 71-77.]
- [10] 胡鞍钢. 中国实现2030年前碳达峰目标及主要途径[J]. 北京工业大学学报(社会科学版), 2021, 21(03): 1-15. [HU A G. China's goal of achieving carbon peak by 2030 and its main approaches[J]. Journal of Beijing University of Technology (Social Science Edition), 2021, 21(03): 1-15.]
- [11] 马云,张吉磊,王新星,等. 天然气甲基二乙醇胺法脱硫脱碳工艺过程模拟分析[J]. 化学工程, 2015, 43(04): 69-74. [MA Y, ZHANG J L, WANG X X, et al. Simulation of natural gas methyl-diethanolamine decarbonization and desulphurization process[J]. Chemical Engineering (China), 2015, 43(04): 69-74.]
- [12] 王茹洁,刘闪闪,陈博,等. MEA活化MDEA工艺天然气选择性脱硫脱碳研究[J]. 天然气化工(C1化学与化工), 2019, 44(05): 45-49. [WANG R J, LIU S S, CHEN B, et al. Selective removal of H_2S over CO_2 from natural gas by MEA-activated MDEA[J]. Natural

- Gas Chemical Industry, 2019, 44(05): 45–49.]
- [13] 常学煜, 李玉星, 张盈盈, 等. 天然气脱酸工艺参数优化及节能研究[J]. 天然气化工(C1 化学与化工), 2017, 42(03): 67–72+92. [CHANG X Y, LI Y X, ZHANG Y Y, et al. Optimization of process parameters and energy-saving research for natural gas deacidification process[J]. Natural Gas Chemical Industry, 2017, 42(03): 67–72+92.]
- [14] 刘卜玮, 林文胜. 制氢中变气活化MDEA法脱碳工艺流程模拟与优化[J]. 天然气化工(C1 化学与化工), 2021, 46(04): 78–83. [LIU B W, LIN W S. Simulation and optimization of process flow of activated MDEA decarburization of shift gas in hydrogen production system[J]. Natural Gas Chemical Industry, 2021, 46(04): 78–83.]
- [15] 王东风, 孟丽. 粒子群优化算法的性能分析和参数选择[J]. 自动化学报, 2016, 42(10): 1552–1561. [WANG D F, MENG L. Performance Analysis and Parameter Selection of PSO Algorithms[J]. Acta Automatica Sinica, 2016, 42(10): 1552–1561.]
- [16] JAVALOYES-ANTON J, RUIZ-FEMENIA R, CABALLERO J A. Rigorous design of complex distillation columns using process simulators and the particle swarm optimization algorithm[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2013, 52(44): 15621–15634.
- [17] 杨泽军, 朱海山, 刘向东. 利用HYSYS Automation大幅提高工艺模拟效率的方法[J]. 计算机与应用化学, 2016, 33(07): 827–832. [YANG Z J, ZHU H S, LIU X D. A method to improve the efficiency of process simulation with HYSYS automation[J]. Computers and Applied Chemistry, 2016, 33(07): 827–832.]
- [18] 郑雪枫, 王红, 林畅, 等. 基于HYSYS模型和遗传算法的天然气液化流程参数优化[J]. 化学工程, 2014, 42(07): 66–69. [ZHENG X F, WANG H, LIN C, et al. Optimization of process parameters of natural gas liquefaction based on HYSYS model and genetic algorithm[J]. Chemical Engineering (China), 2014, 42(07): 66–69.]
- [19] 李泳江, 姚宇光, 徐畅, 等. 往复式活塞式压缩机实际功率的计算模型及能耗分析[J]. 油气田地面工程, 2017, 36(2): 18–20. [LI Y J, YAO Y G, XU C, et al. Calculation model and energy consumption analysis of actual power of the piston compressor[J]. Oil-Gasfield Surface Engineering, 2017, 36(2): 18–20.]

(责任编辑 韩晔华 编辑 付娟娟)