正己烷分离的多目标优化

梁士锋[1,2]，姜 斌[1,2]

(1 天津大学化工学院，天津，300072；2 精馏技术国家工程研究中心，天津，300072)

摘要： 本文将多目标优化软件modeFRONTIER同化工流程模拟软件PRO/II相结合，模拟正己烷分离塔，并采用遗传算法多目标优化产品纯度和收率。优化结果表明正己烷的收率和纯度存在较明显的Pareto关系，根据Pareto解集可得出优化点。这为正己烷分离的设计和实际操作提供了依据。

关键词： modeFRONTIER，遗传算法，多目标优化，正己烷分离

Multi-objective Optimization of Hexane Separation

LiangShifeng[1,2], Jiangbin[1,2]

(1.School of Chemical Engineering and Technology,Tianjin University,Tianjin, 300072, China;2.National Engineering Research Center for Distillation Technology, Tianjin, 300072, China)

Abstract: The combination of the optimization software, modeFRONTIER, and the chemical process simulator PRO/II is used to simulate hexane separation. The Multi-Object Genetic Algorithm(MOGA) is adopted to optimize the yield and purity .The optimization results show that the relation between yield and purity of hexane is obvious Pareto relation, the optimal point can be obtained from the Pareto sets. This provides a foundation for optimizing the design and practical operations of hexane separation.

Keywords: modeFRONTIER, genetic algorithms, multiobjective optimization, hexane separation

1 引言

随着计算机科学的迅猛发展,化工流程模拟软件在石油化工领域中发挥着越来越大的作用，主要代表有Aspen Plus、Pro/II、HYSIM以及CHEMCAD等。然而由于化工工艺模拟涉及众多变量，需要确定原料的物性、热力学方程以及系统的操作条件等众多参数，都有赖于化学工程师的深厚理论和实践经验。工艺流程建立以后，提高产量降低能耗，获取最大的经济效益，就必须优化，通常得花费大量的时间不断调整参数，即使这样仍是局部优化，只优化了某些参数或设备，因此，优化整体流程对于工艺流程模拟就有非常重要的意义。流程的整体优化涉及产品的产量和质量，加上系统能耗的优化，这就是一个多目标优化问题。多目标优

化在化工领域越来越受关注，研究人员已经做了有益的工作，如Tarafder等人运用NSGA-Ⅱ遗传算法，优化了工业苯乙烯生产流程的产率、收率和选择性[1]，熊俊文等对催化裂化分馏塔的重石脑油和轻柴油流量进行了多目标优化[2]。但是工艺流程模拟软件并不具备多目标优化功能，因此必须寻找有效而且方便的多目标优化方法。modeFRONTIER可以作为多目标优化软件的杰出代表，在航空航天、冶金和化工等众多领域中已广泛应用。它对特定的化工工艺流程作多目标优化，得到一系列优化工况点，可以节约模拟时间、提高经济效益，这正是化工模拟多目标优化的价值所在。

2 系统简介及流程

正己烷是重要的基本有机化工原料，目前生产正己烷的方法主要有吸附、精馏加氢等。国外采用分子筛吸附法，如美国Richfield oil公司Watson厂，以重整抽余油为原料，通过循环使用2个或2个以上床层吸附、降压脱附，生产纯度较高的(98%)正己烷[3]。国内多采用精馏与加氢相结合的工艺，生产的正己烷纯度都在60%～80%[4,5]。正己烷的精馏加氢工艺主要由己烷分离和加氢精制两步份构成，己烷分离部分采用精馏的方法将原料中的轻重组分除去，然后送入加氢反应器进行精制。因此，己烷分离部分直接关系到最终的产品质量问题，提高产品质量同时保持高的收率，这就是一个多目标优化问题。本文针对国内某化工厂正己烷装置的扩能改造，利用多目标优化软件modeFRONTIER集成化工流程模拟软件Pro/Ⅱ，对其进行多目标优化，找出目标函数的Pareto解集，提高产品纯度，同时又保持高的收率，对装置的扩能改造提供了很好的指导意义。正己烷分离部分的流程如图1所示。

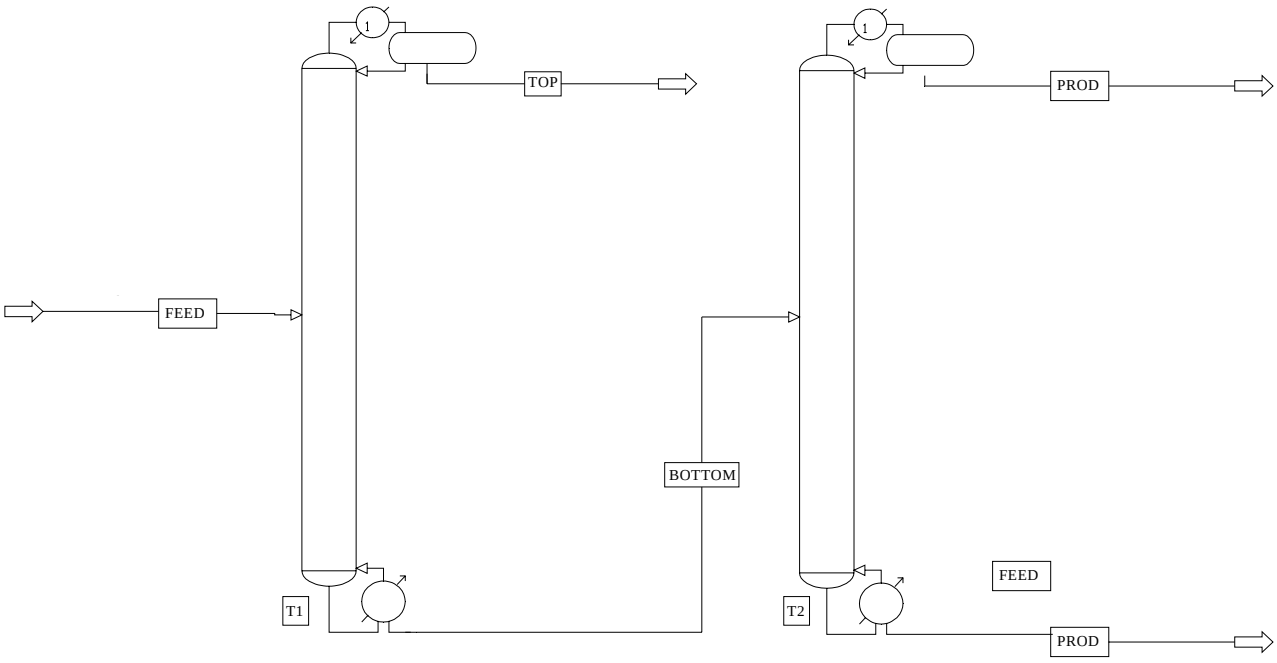

Fig.1 Separation of n-hexane flowchart

图1 正己烷分离部分流程图

3 流程模拟及多目标优化

3.1基础数据和质量控制指标

国内某化工厂计划将正己烷产量从12000t/a扩产到18000t/a，按实际要求，18000t/a模拟基础数据及控制指标如下：

1) 进料量FEED为1100kg/h

2) T1塔塔顶压力为0.175MPa（绝压），单板压降为0.0003 MPa，；T2塔塔顶压力为0.15 MPa，单板压降为0.0003 MPa。

3) 进料组成，见表1。

4) 质量控制指标为：T2塔顶产品PROD中正己烷纯度>0.6(wt)

表1 进料组成

Table1 feed composition

序号	组分分子式	质量分率	序号	组分分子式	质量分率
1	C5H12-1	0.006	8	C7H16-3	0.262
2	C6H14-4	0.052	9	C7H16-1	0.089
3	C6H14-2	0.158	10	C8H18-7	0.013
4	C6H14-3	0.116	11	C8H18-3	0.025
5	C6H14-1	0.163	12	C8H18-1	0.01
6	C6H12-2	0.038	13	C8H10-2	0.017
7	C7H16-2	0.028	14	C9H20-1	0.023

3.2算法介绍

传统的多目标算法，如加权组合法、目标规划法等，都是基于方向搜索的优化方法，需要导数信息，并且易于收敛到局部最优，而多目标遗传算法（MOGA）则继承了遗传算法的随机性和隐含并行性，能够同时搜索到多个局部最优解，因此越来越受关注[6]。软件modeFRONTIER在处理多目标问题中，引入Pareto边界的概念，Pareto边界上的任意点都是Pareto解，即改善一个目标必然削弱其它目标。此外，软件所采用的多目标遗传算法，引进了智能多向搜索精英（smart multisearch elitism），既保留一些极好的解而又不会提前收敛于局部最优。

3.3 试验设计

试验设计称DOE（Design of Experiment），是减少计算次数、获取设计空间信息、优化前的重要步骤， 其本质是为设计空间采样。常用的试验设计方法有随机序列法、Sobol 序列法、蒙特卡罗法、全因子法、简因子法、面心立方法、Box-Behnken法、拉丁方法、田口

矩阵法等。其中随机序列法是按照随机化的原则，选择实验点或者实验因素水平。随机化实验的优点是使用范围广，主要用于实验条件复杂，其他方法难以代替的情况[7]。当前采用随机序列法，生成16个点作为优化的初始点。

3.4 优化目标和设计变量

3.4.1 优化目标（2个）

1）产品中正己烷的纯度

2）正己烷的收率

3.4.2 设计变量（8个）

影响正己烷分离的因素很多，由于本文所用软件Pro/II和优化软件modeFRONTIER，受自身以及相互之间耦合的限制，目前只研究了表2中影响优化目标的8个设计变量。

表2 影响优化目标的设计变量

Tab 2 design variables influencing optimum targets

序号	1	2	3	4	5	6	7	8
	T1P	T1_BOTTOM	T1R	T1_LOCATION	T2P	T2_PROD	T2R	T2_LOCATION
变量	T1塔塔顶压力 KPa	T1塔塔底馏量 KG／h	T1塔回流比	T1塔进料位置	T2塔塔顶压力 KPa	T2塔塔顶馏量 KG／h	T2塔回流比	T2塔进料位置
范围	140-205	6160-9240	1-15	1-54	120-180	2000-3000	1-15	1-54

3.4.3 约束条件（2个）

根据产品质量要求，做了以下两个约束

1) T1塔底流股BOTTOM中C5H12-1质量流量<0.001KG/h

2) T2塔顶流股PROD中C7H16-2质量流量<0.001KG/h

3.5 优化工作流程

图2为优化工作流程。

图中最左边的T1P到T2R是8个设计变量，n_hexane.inp是Pro/II软件的输入文件，n_hexane.out是Pro/II软件的输出文件，MAXshoulv和MAXpure为要进行优化的两个目标函数，右下角BOTTOM_C5_1和PROD_C7_1是两个约束条件。图中的DOE和MOGAⅡ分别为试验设计模块和本次优化所采用的算法，n_hexane.sh是UNIX程序，负责对整个优化流程的控制。由于Pro/II软件和modeFRONTIER不能直接相连接，所以我们利用其它软件实现了这个功能，这就是图中的SupportFile的作用。

优化流程的具体实现如下：首先由modeFRONTIER的DOE(design of experiments)功能产生一组初始参数，为8个设计变量赋值，作为优化算法的初始解集。接着用Pro/II程序批处理运算。Pro/II运算完成以后，modeFRONTIER会从输出文件n_hexane.out中提取出有用的输

出变量，对目标函数和约束条件进行运算；根据计算结果，modeFRONTIER会不断更新Pro/II软件的输入文件。当达到设定的遗传代数后，优化停止。优化结束后，modeFRONTIER强大的后处理功能使我们能够轻松地处理运算结果，根据实际选取Pareto解集。集合中元素称为Pareto最优或非劣最优(non-dominated) [8]。 所谓Pareto最优就是不可能通过优化其中部分目标而其它目标不致劣化。

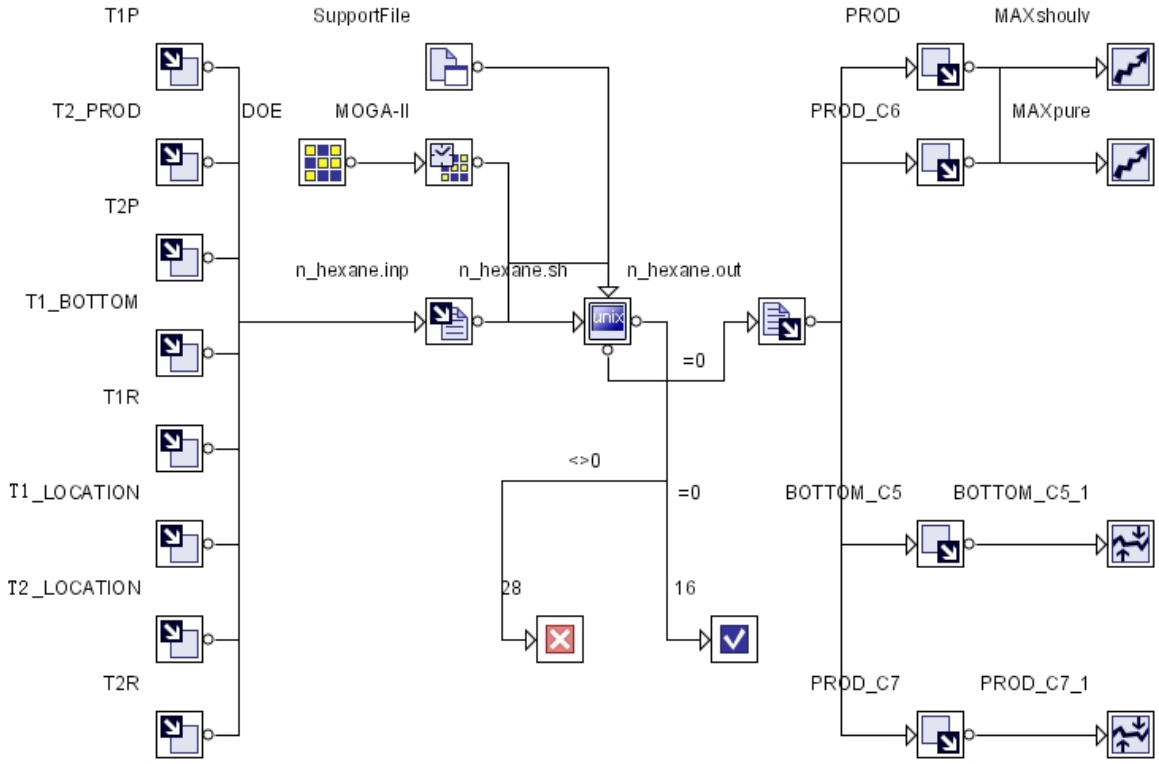

Fig.2 The optimized work flowsheet

图2 优化工作流程图

3.6 优化结果

图3是经多目标优化后正己烷收率和纯度的Pareto解集。图中五角星点表示优化前的设计值，三角形表示的可行解是经过Pro/II模拟且不违反约束条件的解，圆点表示Pareto解，曲线是优化后所得的Pareto曲线。从图中可以看出，设计点并没处于最优状态，通过优化后正己烷纯度和收率都有提高，在理论上对正己烷分离塔的改造有指导意义。

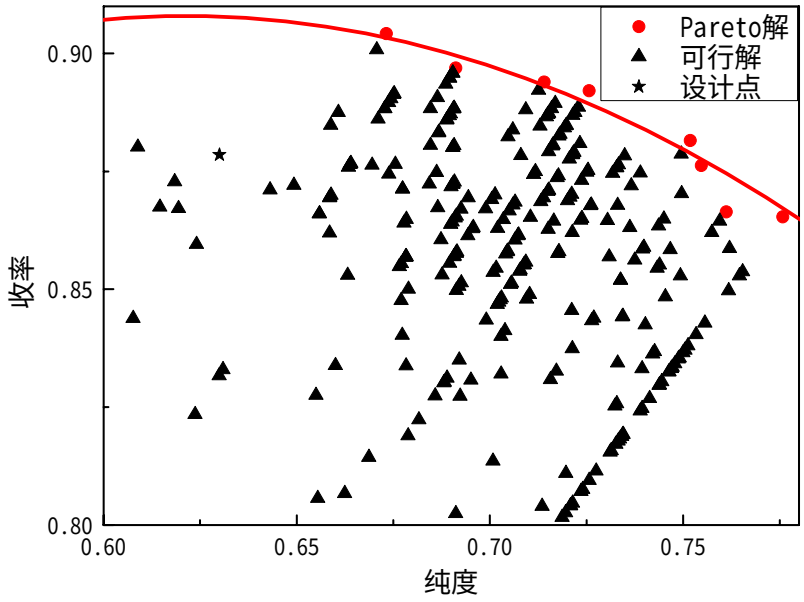

Fig.3 Pareto solution of yield and purity

图 3 收率和纯度的 Pareto 解

4 结论

1) 工艺流程模拟软件PRO/II和多目标优化软件modeFRONTIER的联合应用可以有效处理正己烷生产中精馏分离部分的多目标优化问题。

2) 正己烷收率与纯度存在较明显的Pareto优化关系。

3) 现有工艺的经验工作点都处在优化区域之内，说明Pareto优化点符合实际情况。

4) 根据Pareto曲线可得出优化点，在理论上对设计和操作产生指导意义。

参考文献

1 N. Bhutani, A. Tarafder, A. K. Ray, et al. Multi-objective optimization of industrial styrene production using a process simulator and a genetic algorithm[R]. AIChE Annual Meeting, Texas, USA (2004).

2. 熊俊文，吕翠英. 催化裂化分馏塔多目标遗传算法优化. 计算机与应用化学，2006, 23(5): 462-464

3 魏文德主编. 有机化工原料大全·己烷. [第一卷]. 北京: 化学工业出版社，1991

4 谭天恩. 蒸馏，化工原理·蒸馏. 北京: 化学工业出版社，1992

5 侯祥麟主编. 中国炼油技术·加氢精制. 北京: 中国石化出版社，1991

6. 王晓鹏. 多目标优化设计中的Pareto遗传算法。系统工程与电子技术，2003，25(12): 1558-1561.

7. 刘文卿. 实验设计. 北京: 清华大学出版社, 2005，54-57.

8.谢涛，陈火望，康立山.多目标优化的演化算法.计算机学报，2003，26(8):997-1003