深冷空分系统的过程模拟、优化及㶲分析

熊　杰　赵海波　郑楚光

(华中科技大学煤燃烧国家重点实验室　武汉　430074)

摘　要:针对氧燃烧技术对氧气的特殊需求,利用 ASPEN PLUS 软件对一概念深冷空分系统进行了过程模拟,并对系统中的重要部件—蒸馏塔进行了设计优化。优化变量选取蒸馏塔中的 3 个重要参数: 总级数、入流级数以及回流率。在得到空气分离过程所需的最小总级数、最小回流率的基础上利用一定的经验代数关系得到了总级数和入流级数的最优值,并依此得到了此时的最佳入流级数。基于优化工况的结果,对整个系统进行了㶲分析。

关键词:深冷空分　ASPEN PLUS　㶲分析　设计优化　氧燃烧

中图分类号:TB657,TK11　　**文献标识码**:A　　**文章编号**:1000-6516(2011)03-0039-05

Simulation optimization and exergy analysis of a cryogenic air separation

Xiong Jie　Zhao Haibo　Zheng Chuguang

(State Key Laboratory of Coal Combustion, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, China)

Abstract: Regarding to the special oxygen demand of the oxy-combustion technology, a conceptual cryogenic air separation system was simulated using ASPEN PLUS. And a design optimization was conducted to the distillation column. Three parameters were chosen to optimize the column: feed stage, total number of stages and reflux ratio. After the minimal total number of stages and minimal reflux ratio were obtained, the optimum total number of stages and reflux ratio can be found out by using some experiential algebraic equations. Based on these optimum results, the optimum feed stage can be fixed. Finally, an exergy analysis was performed to the air separation system based on the optimum case.

Key words: cryogenic air separation; ASPEN PLUS; exergy analysis; design optimization; Oxy-combustion

1　引　言

在中国,60% 的能源需求由燃煤提供,因此燃煤电厂是 CO_2 最主要的排放源。在众多 CO_2 减排方法中,氧燃烧由于与现有燃煤锅炉技术承接性最好、工业接受度高、污染物近零排放等而受到特别关注,有望在短期内实现商业运行。

氧燃烧技术是用高浓度的 O_2 代替空气进行燃烧,并将 70% 左右产生的烟气循环,一来可以补充缺少的 N_2 空间,二来可以控制炉膛温度[1-2]。为了得到持续高浓度的 O_2,氧燃烧系统中必须配备空气分离装置[3]。氧燃烧系统的示意图如图 1 所示。

收稿日期: 2011-04-14; **修订日期**: 2011-05-25
基金项目: 国家自然科学基金重点项目(50936001),教育部新世纪优秀人才支持计划(NCET-10-0395)。
作者简介: 熊　杰,男,27 岁,博士研究生。

© 1994-2013 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

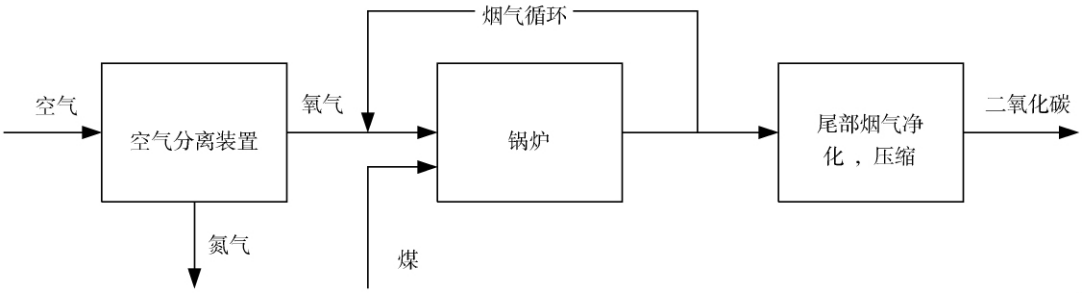

图 1 氧燃烧系统示意图

Fig. 1 Schematic diagram of Oxy-combustion system

空气分离的方法通常有 3 种: 低温分离(深冷)，变压吸附和膜分离。对于氧燃烧系统，需要大量的高纯度 O_2(95% 以上，对于 2×300 MW 燃煤机组需要 300 000 Nm^3/h 以上)，采用深冷法是目前唯一选择[4-5]。在深冷空分系统中，如对 O_2、N_2 的浓度有很高要求(99.5% 以上)，蒸馏过程通常需在 3 个塔中完成: 高压塔、低压塔以及 Ar 提纯塔。但是，在氧燃烧过程中，因为对 O_2 的浓度要求并没有那么严格(95% 即可)，对于 N_2 更是几乎没有要求[6-7]。因此，针对氧燃烧的特殊需求，本文在保证氧气浓度的前提下对空分系统进行了简化，系统中只包含一个蒸馏塔(包含冷凝器和再热器)，这样将大大降低空分系统的成本投入，也将相应降低氧燃烧系统的成本屏障，提高氧燃烧系统的竞争力。

本文使用商业过程模拟软件 ASPEN PLUS 对此深冷空分系统进行了模拟和优化。ASPEN(Advanced System for Process Engineering) 是 1976—1981 年由 MIT 主持，能源部资助，55 个高校和公司参与开发而完成的一套大型软件。ASPEN PLUS 是其众多产品中的一个，主要功能是对化工，能源等系统进行稳态模拟。ASPEN PLUS 中的模拟过程基于模块化，通常采用序列求解的办法，模块之间采用物流，热流或者能流进行连接。ASPEN PLUS 中包含大量的组分，丰富的物性数据库和物性方法，涉及物理特性，化学特性以及热力学特性，在工程应用中有着广泛的适用范围和强大的处理能力。

2 深冷空分系统模拟

深冷空分系统在 ASPEN PLUS 中的模拟流程图如图 2 所示。系统流程包含 4 个主要部件: 多级压缩机，换热器，蒸馏塔和节流阀。图中实线表示物流，虚线表示能量流。系统模拟选取的物性方法为 PENG-ROB，它被推荐用于气体加工炼油及化工应用，对所有温度和压力都可能获得合理的计算结果，并且在临界区域内也能一致。入流空气的物理参数以及组成如表 1 所示。

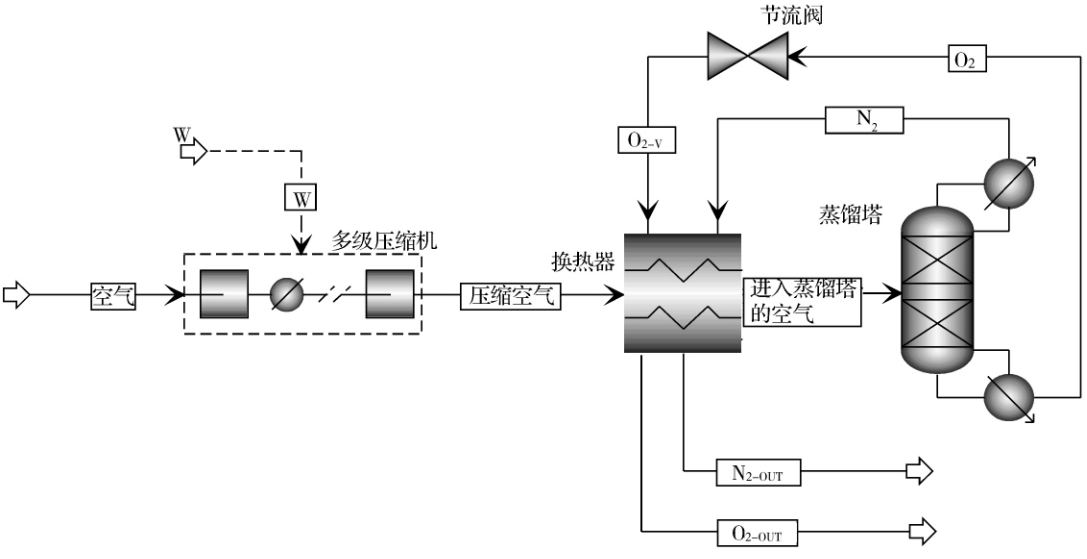

图 2 深冷空分系统模拟流程图

Fig. 2 Simulation flowsheet of cryogenic air separation system

© 1994-2013 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

表 1　入流空气的物理参数及组成

Table 1　Thermodynamic parameters and chemical composition of inlet air flow

温度/℃	压力/kPa	质量流率/(kg/h)	组分摩尔分率		
			N_2	O_2	Ar
25	101.325	1	0.780 8	0.209 5	0.009 7

多级压缩级共包含 4 级，每一级由一个单级压缩机和一个中间换热器组成，每级中的换热器均使用冷却水将空气冷却到 20 ℃，最终级的出口压力设定为 6.3×10^5 Pa，每一级压缩机的等熵效率为 0.8，机械效率为 0.97。

蒸馏塔中生成的氮气和氧气在换热器中将来流压缩空气冷却到饱和状态，以用来分离。3 股物流的压力损失均设定为 0.1×10^5 Pa。蒸馏塔包含一个冷凝器(上端)和一个再热器(下端)。根据氧气、氮气的沸点(分别为 −183 ℃和 −196 ℃)可以推断，蒸馏塔上端产品为氮气，下端产品为氧气。上端和下端产品的出口压力分别设定为 1.5×10^5 Pa 和 5.8×10^5 Pa。在蒸馏塔的模拟计算中，设置的初始值为：总级数为 30；入流级数是总级数的一半，即 15；下端出口质量流率与总入流质量流率之比(B/F)设定为 0.215。为了使下端出口氧气的摩尔浓度达到 95%，在蒸馏塔的模拟过程中使用 ASPEN PLUS 中的设计规定功能，调控回流率的数值，设置的范围为(0.1—100)。同时，通过使用另一个设计规定用以调控蒸馏塔入流的热力状态(湿度)，以使得蒸馏塔中冷凝器中吸收的冷量和再热器中吸收的热量平衡。模拟结果如表 2 所示。

表 2　深冷空分系统模拟结果

Table 2　Simulation results of cryogenic air separation system

回流率	W/W	单级压缩率	物流温度/℃						氮气出口浓度
			进入蒸馏塔的空气	N_2	O_2	$O_{2\text{-}V}$	$N_{2\text{-}OUT}$	$O_{2\text{-}OUT}$	
0.967	58.98	1.58	−172.8	−192.0	−162.9	−179.7	−33.1	−33.1	99.1%

3　蒸馏塔优化

为了使蒸馏塔的分离、经济性能接近最优，选取了 3 个参数加以优化：总级数，入流级数以及回流率[8-9]。确定此 3 者优化值的方法[8]以及优化的过程、结果如下。

3.1　优化总级数

蒸馏塔的总级数，不仅直接影响分离产品的浓度，更是直接影响了蒸馏塔的高度，与蒸馏塔的成本直接相关。因此，确定蒸馏塔的总级数十分重要。采取的方法是先确定满足分离要求所需要的最小级数，而最优级数 = 最小级数 × 2 + 2[8]。最小级数的确定方法是不断降低总级数，为满足分离需求，回流率将慢慢趋向于无穷大(本文中的界定为大于 100)，此时的蒸馏塔级数即为最小级数。降低总级数时，确保入流级数与总级数的比例(N_F/N)不变，因为最佳 N_F/N 的数值是不随总级数的增减而变化的。优化总级数得到的结果如表 3 所示，表中数值第一列对应着模拟的初始结果，加粗的数值对应着最小总级数(13)，因此最优总级数为 28。

表 3　总级数优化结果

Table 3　Simulation results for different total stages numbers

参数	优化结果				
总级数	30	20	16	14	13
入流级数	15	10	8	7	7
回流率	**0.97**	**1.42**	**2.58**	**6.86**	**>100**

3.2　优化回流率

蒸馏塔回流率的物理意义是塔中回流的液相与冷凝出口产品的摩尔量之比。回流率对于产品浓度、能量消耗以及蒸馏塔直径有着很大的影响。确定最优回流率的方法是先确定分离所需要的最小回流率，而最优回流率 = 最小回流率 × 1.2[8]。最小回流率的确定方法是不断增加总级数，直到所需的回流率不再降低，此时的回流率即为最小回流率。增加总级数时，同样确保入流级数与总级数的比例不变。优化回流率得到的结果如表 4 所示，表中数值第一列对应着模拟的初始结果，加粗的数值即为最小回流率(0.87)，因此最优回流率为 1.044。

© 1994-2013 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

表 4 回流率优化结果

Table 4 Simulation results for different reflex ratios

参数	优化结果				
总级数	30	40	50	60	70
入流级数	15	20	25	30	35
回流率	0.97	0.89	**0.87**	**0.87**	**0.87**

3.3 优化入流级数

蒸馏塔入流级数对冷凝器、再热器中须提供的冷量、热量有着直接的影响，同时也对满足蒸馏条件的回流率有着很大的影响，最优入流级数认为是使得热(冷)耗最小时的级数[8]。将冷凝器中消耗的冷量作为评判标准来优化入流级数。需要指出的是，总级数和回流率的最优值是不能同时使用(满足)的，任选一个来完成入流级数的优化。选取优化总级数 28，设计规定中调节回流率以满足蒸馏要求。优化入流级数得到的结果如图 3 所示，最优入流级数是第 15 级，此时回流率和冷量消耗均达到最小。同时，从图 3 也可以看出回流率与冷量消耗随入流级的变化规律是一致的。

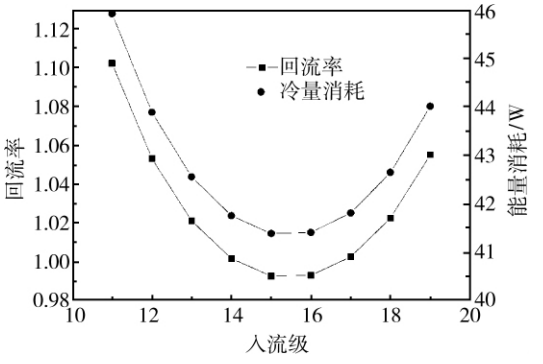

图 3 入流级数优化结果图

Fig 3 Simulation results for different feed stages

4 㶲分析

基于最优状态下的模拟结果，对此空分系统进行了㶲分析。㶲的定义为：在除环境外无其它热源的条件下，当系统由任意状态可逆地变化到与给定的环境相平衡的状态时，能够最大限度转换为有用功的那部分能量[10]。简单而言，㶲是因为所考虑的系统和环境存在不平衡造成的，而根据不平衡的方式，㶲可以总体分为两类：物理㶲和化学㶲。而物理㶲又可以进一步细分为焓㶲、动能火用以及势㶲。

对于热力系统而言，例如本文考虑的空分系统，动能㶲和势㶲是可以不作考虑的，因此需要考虑的即焓火用和化学㶲。计算㶲的前提是对参考环境的定义，不仅是环境的温度、压力，还包括环境的组成成分。本文选取的环境参数[11]定义如表 5 所示：

表 5 参考环境参数定义

Table 5 Reference environment definition

温度 T_0/K	压力 p_0/kPa	组分		
		气态组分及摩尔浓度		其它组分(T_0,P_0)
298.15	101.325	N_2	0.7 567	液态水
		O_2	0.2 035	石灰石($CaCO_3$)
		H_2O	0.0 303	石膏($CaSO_4 \cdot 2H_2O$)
		Ar	0.0 091	
		CO_2	0.0 003	

对于焓㶲和化学㶲的计算方法不做详细介绍，参阅文献[10，12]。表 6 给出了空分系统中每一条物流(能流)包含的物理㶲以及化学㶲。

表 6 空分系统㶲计算结果

Table 6 Exergy calculation results of the cryogenic air separation system

物流(能流)	物理㶲/kW	化学㶲/kW
空气	0	1 284.92
压缩空气	75 199.70	1 284.92
进入蒸馏塔的空气	188 643.73	1 284.92
N_2	79 073.76	7 784.76
O_2	63 590.49	1 2861.19
$N_{2\text{-}OUT}$	12 933.98	7 784.76
$O_{2\text{-}OUT}$	3 533.85	1 2861.19
$O_{2\text{-}V}$	62 608.06	1 2861.19
W	102 242.90	–

基于表 6 中的数据，可以对此空分系统进行㶲损分析，分析得到的结果如表 7 所示。㶲损可以分为 2 类：㶲耗散(exergy destruction，E_D)和㶲损失(exergy loss，E_L)[10]。㶲耗散是部件或者系统中存在的不可逆所引起的，也是由于热力或经济上的局限性所照成的；而㶲损失通常是针对整个系统而已，通常是排放到环境中的热㶲损失或者副产品中所包含的㶲。本文计算中将空分系统中氮气产品所包含的㶲定义为㶲损失。从表 7 中的结果可以看出：多级压缩机和蒸馏塔是系统中㶲耗散最大的两个部件，同时，系统的㶲损失也较大，整个空分系统的㶲效率为 15.84%。

© 1994-2013 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

表 7　空分系统㶲损分析结果

Table 7　Exergy destruction and exergy loss analysis results of cryogenic air separation system

部件	$E_{D,i}(E_{L,i})$	$^{a}E_{D,i}/E_{D,T}$	$^{b}E_{D,i}(E_{L,i})/E_F$
多级压缩机	27 043.20	40.72%	26.12%
换热器	11 769.96	17.72%	11.37%
蒸馏塔	26 618.46	40.08%	25.71%
节流阀	982.43	1.48%	0.95%
总㶲耗散	66 414.04	100.00%	64.15%
㶲损失	20 718.74	–	20.01%
空分总㶲损 /kW	87 132.78		84.16%
进入系统总㶲/kW	103 527.82		

[a] 为部件㶲耗散与总㶲耗散的比率; [b] 为部件㶲耗散与进入系统总㶲的比率。

5　总　结

针对氧燃烧系统对氧气的浓度需求特点,对一概念深冷空分系统进行了结构调整,并使用 ASPEN PLUS 软件对系统进行了模拟,模拟计算得到的氧气浓度(95%)可以满足氧燃烧系统的要求。同时,得到的氮气浓度高达 99.1%,这样就保证了氧气产品的较高流量和效率。在模拟结果的基础上,重点选取了蒸馏塔中的总级数,入流级数以及回流率 3 个参数进行了设计优化,在得到分离所需的最小总级数,最小回流率的前提下利用经验公式得到了选取的 3 个参数的最优值,分别为 28 级,15 级和 1.044。利用使用的优化方法和得到的优化数值可以指导蒸馏塔的设计,使得深冷空分系统的物理、经济性能达到更优,也使得氧燃烧技术更具有经济性能上的优势。

对空分系统㶲分析的结果显示: 在空分系统中,多级压缩机和蒸馏塔的㶲耗散最大,均占总㶲耗散的 40% 左右。整个空分系统的㶲效率为 15.84%,在所有㶲损中,㶲耗散占 64.15%,㶲损失占 20.01%。

参　考　文　献

1　熊　杰,赵海波,柳朝晖,等. 基于热经济学的 O_2/CO_2 循环燃烧系统和 MEA 吸附系统的技术-经济评价 [J]. 工程热物理学报, 2008, 29(10): 1625-1629.

2　Wall T F. Combustion processes for carbon capture [J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2007, 31(1): 31-47.

3　Xiong J, Zhao H, Zheng C, et al. An economic feasibility study of O_2/CO_2 recycle combustion technology based on existing coal-fired power plants in China [J]. Fuel, 2009, 88(6): 1135-1142.

4　Vinson D R. Air separation control technology [J]. Computers & Chemical Engineering, 2006, 30(10-12): 1436-1446.

5　Jordal K, Anheden M, Yan J, et al. Oxyfuel combustion for coal-fired power generation with CO_2 capture-Opportunities and challenges [C]. Greenhouse Gas Control Technologies 7, Oxford, 2005. 201-209.

6　Allam R J. Improved oxygen production technologies [J]. Energy Procedia, 2009, 1(1): 461-470.

7　Andersson K, Johnsson F. Process evaluation of an 865 MWe lignite fired O_2/CO_2 power plant [J]. Energy Conversion and Management, 2006, 47(18-19): 3487-3498.

8　Luyben W L. Distillation Design and Control Using Aspen Simulation [M]. Hoboken, New Jersey: John Wiley & Sons, 2006.

9　Kister H Z. Distillation Design [M]. New York: McGraw-Hill, 1992.

10　Bejan A, Tsatsaronis G, Moran M J. Thermal design and optimization [M]. New York: Wiley, 1996.

11　Daniel J J, Rosen M A. Exergetic environmental assessment of life cycle emissions for various automobiles and fuels [J]. Exergy, An International Journal, 2002, 2(4): 283-294.

12　朱明善. 能量系统㶲分析(第一版) [M]. 北京: 清华大学出版社, 1989.

(上接第 33 页)

13　Agrawal N, Bhattacharyya S. Perormance optimization of a transcritical carbon dioxide heat pump system using capillary tube for simultaneous cooling and heating applications [C]. In: International Congress of Refrigeration, Beijing, 2007.

14　Cao Xiaolin, Yu S X. Simulation on the flow of carbon dioxide in capillary tubes in a transcritical refrigeration system [C]. In: International Congress of Refrigeration, Beijing, 2007.

15　Pate M B, Tree D R. An analysis of pressure and temperature measurement along a capillary tube-suction line heat exchanger [J]. Ashrae Trans, 1984, 90(2): 291-301.

16　Xu B, Bansal P K. Non-adiabatic capillary tube flow: a homogeneous model and process description [J]. Appl Thermal Eng, 2002, 22: 1801-1819.

17　Chen Y, Gu J. Non-adiabatic capillary tube flow of carbon dioxide in a novel refrigeration cycle [J]. Appl Thermal Eng, 2005, 25: 1670-1683.

18　Agrawal N, Bhattacharyya S. Performance evaluation of a non-adiabatic capillary tube in a transcritical CO_2 heat pump cycle [J]. International Journal of Thermal Sciences, 2007, 47(4): 423-430.

19　Bialko B, Krolicki Z. The capillary tube application in a CO_2 air-conditioning system [C]. In: International Congress of Refrigeration, Beijing, 2007.

20　Agrawal N, Bhattacharyya S. Non-adiabatic capillary tube flow of carbon dioxide in a transcritical heat pump cycle [J]. Energy Conversion and Management, 2007, 48: 2491-2500.

© 1994-2013 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net