天然气分离中三对角矩阵精馏算法之改进

傅 履 南

（四川深冷设备研究所）

内容提要 Wang-Henke精馏模型已被国内外广泛采用，但是该模型有两个局限。首先，对于第一平衡级不允许有进料，因而仅有传热而无传质。其次，代表进料项的F_j，其流量和组成是固定的，因此该模型不适宜于带中间再沸器或中间冷凝器的精馏塔。本文详述了对这两个局限的改进。

Wang-Henke[1]所发表的三对角矩阵精馏法，由于适用范围广，稳定可靠，收敛速度快，已广泛地被国内所采用。我所开发了这一算法，成功地完成了多套石油气分离设备的计算。经过几年的实践，发现该三对角矩阵精馏算法有两个明显的局限性：一是第一平衡级即塔顶冷凝器仅考虑了热量的交换，没有考虑物质的传递；二是该算法不适用于带中间再沸器或中间冷凝器的精馏问题。为了克服这两个局限性，我们将此算法进行了改进。

Wang-Henke算法的局限性

由于Wang-Henke算法的模型是把塔顶冷凝器作为第一平衡级，因而对于没有塔顶冷凝器的脱甲烷塔或脱乙烷塔来说第一平衡级就是虚设的，既无传热亦无传质，第一平衡级就自然无回流液体流出至第二平衡级。但是实际上，对脱甲烷塔或脱乙烷塔而言，从膨胀机出口而来的两相流，从第二平衡级进塔之后，其汽相部分和第二平衡级上升的汽相部分，由于两者温差较大（如胜利油田50万m^3/d装置的脱乙烷塔，第二平衡级上升的汽相温度为255K，而膨胀机出口进第二平衡级的汽相部分仅为183K），因此必然进行热量的交换传递，也必然有回流液体流至第二平衡级。因此Wang-Henke的精馏计算模型不能适合此种情况。实践表明，按照Wang-Henke模型来计算脱乙烷塔是很难收敛的。为了使迭代得以收敛，我们曾把膨胀机出口的液相部分从第二平衡级进塔，膨胀机出口的汽相部分则和塔顶出来的汽相部分混合，混合后的液体部分再从第二平衡级进塔。显然，这种处理方法不仅繁复，同时要反复调用精馏计算子程序，运行时间势必拖长。现在把Wang-Henke模型的第一平衡级改进为既适用于传热也适用于传质的情况，可以显著地提高精馏计算的效率。

在Wang-Henke的算法中，由于将F_j作为固定的第j平衡级精馏的原料气进料量，其组成Z_{ij}也是固定不变的。因此，如果从j′平衡级引出一股流经过加热或冷却后再回流入j平衡级，则在精馏计算迭代过程中，其流量和组成都是变化的，所以不能把F_j也作为回流量来处理，不适用于带中间再沸器或中间冷凝器的精馏计算。为了克服这一局限性，有必要除F_j外，再增添一项f_j，用以代表中间冷凝器或中间再沸器的回流量，这一项在精馏计算迭代过程中其组成和流量是允许变动的。

改进后的精馏计算模型

图1是将Wang-Henke三对角矩阵精馏算法改进后的模型塔。第一个改进是在第一平衡级上加入一个进料量F_1。对于脱甲烷或塔脱乙烷塔而言，$Q_D=0$，V_2所代表的塔顶出来的汽相部分和F_1所代表的膨胀机出口的汽相部分混合进行热质交换传递，混合后的回流液L_1流出至第二平衡级，$U_1=0$；对于稳定塔或丙烷塔而言，$F_1=0$，$Q_D\neq 0$，和改进前的模型是一致的，换言之Wang-Henke模型是改进后模型的一种特例。

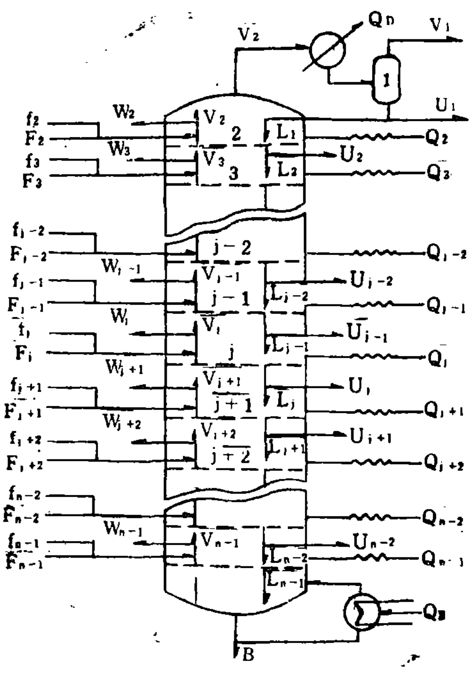

图1　改进的Wang－Henke模型塔

第二个改进是在j平衡级上加入一个代表中间冷凝器或中间再沸器的回流项f_i。如果是中间冷凝器的回流量，则表示是从j'平衡级所抽取出的W_j，经过中间冷凝器冷却，然后回流至j平衡级（j'<j）；如果是中间再沸器的回流量，则表示是从j'平衡级所抽取出的U_j'经中间再沸器加热后回流至j平衡级（j'>j）。

为了叙述方便，先定义的两个函数。

定义　整函数r（j）：

在j平衡级如果有从j'平衡级（j'≠j）来的回流量，则定义r(j)=j'。如果j平衡级上无回流量则定义r(j)=j。

定义　函数　$K_{i,*r(j)}$

当r(j)=j时，$K_{i,*r(j)}=0$；

当r(j)≠j时，若r(j)>j，则$K_{i,*r(j)}=1$，若r(j)<j时，$K_{i,*r(j)}=K_{i,r(j)}$。

其中$K_{i,r(j)}$表示r(j)平衡级上，i组分的平衡常数。

现在推导改进后的模型塔的计算矩阵。

我们从第一平衡级至第i平衡级作全物料平衡可得，

$$L_i=V_{i+1}+F_1+\sum_{k=2}^{i}(F_k+f_k-U_k-W_k)-D \qquad (1)$$

其中$D=V_1+U_1$

对于第一平衡级，可以写出（图2）

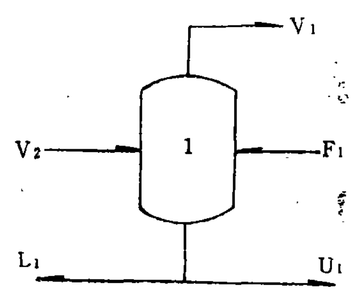

图2　第1平衡级

$$V_2\cdot K_{i,2}\cdot X_{i,2}-V_1\cdot K_{i,1}\cdot X_{i,1}-L_1\cdot X_{i,1}-U_1\cdot X_{i,1}+F_1\cdot Z_{i,1}=0 \qquad (2)$$

合并化简后可得

$$-(L_1+V_1\cdot K_{i,1}+U_1)\cdot X_{i,1}+V_2\cdot K_{i,2}\cdot X_{i,2}=-F_1\cdot Z_{i,1} \qquad (3)$$

对于第j平衡级（图3）

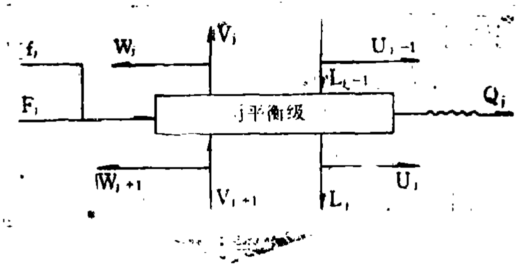

图3 第j平衡级

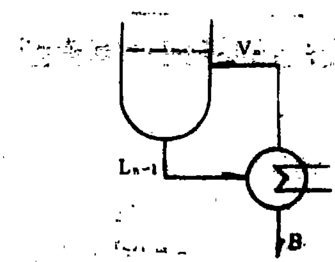

图4 第n平衡级

$$f_j\cdot K_{i,r(j)}^{*}\cdot X_{i,r(j)}+F_j\cdot Z_{i,j}+L_{j-1}\cdot X_{i,j-1}-[(V_j+W_j)]\cdot K_{i,j}+(L_j+U_j)]\cdot X_{i,j}+V_{j+1}\cdot K_{i,j+1}$$

$$X_{i,j+1}=0 \tag{4}$$

稍加整理后可得：

$$f_j\cdot K_{i,r(j)}^{*}\cdot X_{i,r(j)}+L_{j-1}\cdot X_{i,j-1}-[(V_j+W_j)\cdot K_{i,j}+(L_j+U_j)]\cdot X_{i,j}+V_{j+1}\cdot K_{i,j+1}\cdot X_{i,j+1}=-F_j\cdot Z_{i,j} \tag{5}$$

对于n平衡级（图4）

$$L_{n-1}\cdot X_{i,n-1}-(V_n\cdot K_{i,n}+B)\cdot X_{i,n}=0 \tag{6}$$

将（3），（5），（6）联立可得

$$\begin{cases} -(L_1+V_1\cdot K_{i,1}+U_1)\cdot X_{i,1}+V_2\cdot K_{i,2}\cdot X_{i,2}=-F_1\cdot Z_{i,1} \\ f_j\cdot K_{i,r(j)}^{*}\cdot X_{i,r(j)}+L_{j-1}\cdot X_{i,j-1}-[(V_j+W_j)\cdot K_{i,j}+(L_j+U_j)]\cdot X_{i,j}+V_{j+1}\cdot K_{i,j+1}\cdot X_{i,j+1}=-F_j\cdot Z_{i,j} \\ \qquad 2\leqslant j\leqslant n-1 \\ L_{n-1}\cdot X_{i,n-1}-(V_n\cdot K_{i,n}+B)\cdot X_{i,n}=0 \end{cases} \tag{7}$$

假定由（7）式系数组成的矩阵为T，由待求解的组分变量$X_{i,j}$组成的矩阵为X，常数项组成的矩阵为P，可得TX＝P，其中

$$T_{1,1}=-(V_1\cdot K_{i,1}+U_1+L_1)$$

$$T_{1,2}=V_2\cdot K_{i,2}$$

$$P_1=-F_1\cdot Z_{i,1}$$

$$T_{j,r(j)}=\begin{cases} f_j\cdot K_{i,r(j)}^{*} & r(j)\neq j \\ 0 & r(j)=j \end{cases}$$

$$T_{j,j-1}=L_{j-1}=V_j+F_1+\sum_{k=2}^{j-1}(F_k+f_k-U_k-W_k)-D$$

$$T_{j,j}=-[(V_j+W_j)\cdot K_{i,j}+(L_j+U_j)]=-[(V_j+W_j)\cdot K_{i,j}+V_{j+1}+F_1+\sum_{k=2}^{j}(F_k+f_k-U_k-W_k)-D+U_j]$$

$$T_{j,j+1}=V_{j+1}\cdot K_{i,j+1}$$

$$P_j=-F_j\cdot Z_{i,j} \qquad 2\leqslant j\leqslant n-1$$

$$T_{n,n-1}=L_{n-1}=V_n+B$$

$$T_{n,n}=-(V_n\cdot K_{i,n}+B)$$

$$P_n=0$$

由于有了$T_{j,r(j)}$这一项，因而变量$X_{i,j}$的系数所组成的矩阵不再是简单的三对角方阵，而是一种在方阵上半部和（或）下半部出现非0量的‘准’三对角方阵。为了使问题阐述简明而又不失一般性，假定由ξ_1板引流经中间冷凝器冷却后回η_1板，$\eta_1>\xi_1+1$，由ξ_2板引流经中间再沸器加热后回流至η_2板，$\xi_2>\eta_2+1$，于是可得准三对角方阵T'（参看图5）其中，

$$A_j=T_{j,j-1},\quad B_j=T_{j,j},\quad C_j=T_{j,j+1},\quad j\neq\eta_1,\ \eta_2$$

$$E_j=T_{j,r(j)},\quad j=\eta_1,\ \eta_2$$

$\overline{A}_{\eta_1}=T_{\eta_1,\ \eta_1-1}$, $\overline{B}_j=T_{j,j}$,

$j=\eta_1,\eta_2$, $\overline{C}_{\eta_2}=T_{\eta_2,\eta_2+1}$

准三对角方阵T'所代表的物理意义说明如下（参看图5）

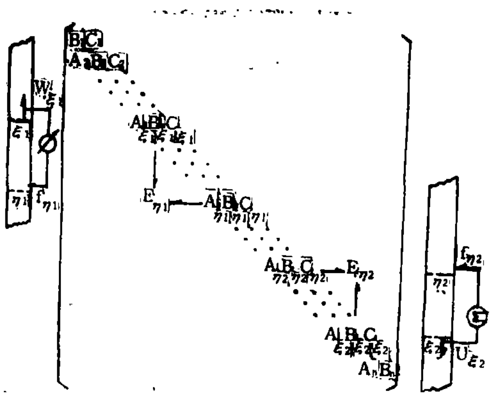

图5 准三对角方阵T'及其物理意义

如果从ξ_1平衡级引出一股汽相流经中间冷凝器冷却后流至η_1平衡级，这时方阵T'的ξ_1列和η_1行的相交处就会出现一个非0的量E_{η_1}；如果从ξ_2平衡级引出液相流经中间再沸器加热后回流至η_2平衡级，这时方阵T'的ξ_2列和η_2行的相交处就会出现一个非0的量E_{η_2}。

方阵T'所组成的方程组T'X＝P，不能直接采用追赶法求解，为此引入方阵$E^{\lambda\delta}$（参看图6）。

方阵$E^{\lambda\delta}$称为'准'单位方阵，它的形式是在单位方阵的η_1行上增添δ_{ξ_1+1}，δ_{ξ_1+1}…，δ_{η_1-1}等元素，在η_2行上增添了λ_{η_2+1}，λ_{η_2+2}，…，λ_{ξ_2-1}等元素。

其中：

$$\delta_{\xi_1+1}=-\frac{E_{\eta_1}}{A_{\xi_1+1}}$$

$$\delta_{\xi_1+2}=-\frac{\delta_{\xi_1+1}B_{\xi_1+1}}{A_{\xi_1+2}}$$

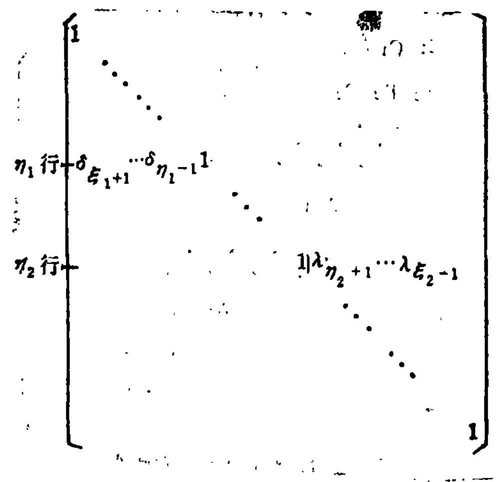

图6 方阵$E^{\lambda\delta}$

$$\delta_{\xi_1+k}=-\frac{\delta_{\xi_1+k-1}B_{\xi_1+k-1}+\delta_{\xi_1+k-2}C_{\xi_1+k-2}}{A_{\xi_1+k}}$$

$K=3,\ \cdots,\ \eta_1-\xi_1-1$

$$\lambda_{\xi_2-1}=-\frac{E_{\eta_2}}{C_{\xi_2-1}}$$

$$\lambda_{\xi_2-2}=-\frac{\lambda_{\xi_2-1}B_{\xi_2-1}}{C_{\xi_2-2}}$$

$$\lambda_{\xi_2-k}=-\frac{\lambda_{\xi_2-k+2}A_{\xi_2-k+2}+\lambda_{\xi_2-k+1}B_{\xi_2-k+1}}{C_{\xi_2-k}}$$

$K=3,\ \cdots,\ \xi_2-\eta_2-1$

设$E^{\lambda\delta}T'=A$，容易验证A已是三对角方阵，其形式参看图7。

方阵A中，除A_{η_1}，B_{η_1}，B_{η_2}，C_{η_2}有变化外，其余元素同方阵T'中的对应元素值。另外，

$$A_{\eta_1}=\delta_{\eta_1-2}C_{\eta_1-2}+\delta_{\eta_1-1}B_{\eta_1-1}+\overline{A}_{\eta_1}$$

$$\begin{bmatrix} B_1 & C_1 \\ A_2 & B_2 & C_2 \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & A_{\eta_1} & B_{\eta_1} & C_{\eta_1} \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & & A_{\eta_2} & B_{\eta_2} & C_{\eta_2} \\ & & & & & \ddots & \ddots \\ & & & & & A_n & B_n \end{bmatrix}$$

图7 $E^{\lambda\delta}$变换后的方阵A

$$B_{\eta_1} = \delta_{\eta_1-1} C_{\eta_1-1} + \overline{B}_{\eta_1}$$

$$B_{\eta_2} = \lambda_{\eta_2+1} A_{\eta_2+1} + \overline{B}_{\eta_2}$$

$$C_{\eta_2} = \lambda_{\eta_2+2} A_{\eta_2+2} + \lambda_{\eta_2+1} B_{\eta_2+1} + \overline{C}_{\eta_2}$$

在$T'X = P$两端，施以$E^{\lambda\delta}$变换，得到

$$E^{\lambda\delta} T' X = E^{\lambda\delta} P$$

令$E^{\lambda\delta}P = D$，则有$AX = D$

其中$D_j = P_j$，$j \neq \eta_1$，η_2

$$D_{\eta_1} = P_{\eta_1} + \sum_{k=\xi_1+1}^{\eta_1-1} \delta_k P_k$$

$$D_{\eta_2} = P_{\eta_2} + \sum_{k=\eta_2+1}^{\xi_2-1} \lambda_k P_k$$

至此，我们就可以用追赶法求解方程组$AX = D$。至于热平衡方程组，推导原理和方法已为大家所熟悉就不赘述了。

符号

A 通过$E^{\lambda\delta}$变换后所得的三对角方阵

A_j 方阵A中的元素

$\overline{A}_{\eta_1}$ 方阵T'中的元素

B 塔釜的流出量

B_j 方阵A'中的元素

$\overline{B}_{\eta_1}$ 方阵T'中的元素

$\overline{B}_{\eta_2}$ 方阵T'中的元素

C_j 方阵A中的元素

$\overline{C}_{\eta_2}$方阵T'中的元素

D 由D_1，$D_2\cdots$，D_n等组成的矩阵

D $D = V_1 + U_1$

D_j $E^{\lambda\delta}P$ 后所得矩阵D的j分量

E_{η_1} 方阵T'中的元素

E_2^{η} 方阵T'中的元素

$E^{\lambda\delta}$ 准单位方阵

f_j 组成和流量都可变动的回流量

F_j 组成和流量都不变动的进料量

$K_{i,r(j)}$ r(j)平衡级，i组分的平衡常数

$K_{i,r(j)}^{*}$ 可以为1，可以为$K_{i,r(j)}$的函数

L_j 由j平衡级流至j+1平衡级的液流量

P 用在方阵组$T'X = P$中的矩阵

P_j 矩阵P的j分量

Q_D 塔顶冷凝器所需冷量

Q_B 塔釜再沸器所需热量

r(j) 整函数

T' 准三对角方阵

U_j j平衡级的液相引出量

V_j j平衡级往j-1平衡级上升的汽量

W_j j平衡级的汽相引出量

$X_{i,j}$ j平衡级，i组分液相组成

$Z_{i,j}$ j平衡级i组分进料组成

δ_{ξ_1+k} $E^{\lambda\delta}$变换方阵的元素

λ_{ξ_2-k} $E^{\lambda\delta}$变换方阵的元素

参 考 文 献

〔1〕 J.C. Wang and G.E. Henke "Tridiagonal Matrix for Distillation, Hydr. Proc., 45〔8〕, P158 (1966)

（本文收到日期 1987年11月20日）