

引用格式:赵军,孙晓岩,陶少辉,等. 基于改进 Edmister模型(AEM)的柔性精馏塔数字孪生简捷模型[J]. 北京化工大学学报(自然科学版),2026,53(4):41-53.

ZHAO Jun, SUN XiaoYan, TAO ShaoHui, et al. A shortcut digital twin model for flexible distillation towers based on the adapted Edmister model (AEM)[J]. Journal of Beijing University of Chemical Technology (Natural Science), 2026, 53(4):41-53.

基于改进 Edmister 模型(AEM)的柔性精馏塔数字孪生简捷模型

赵 军¹ 孙晓岩¹ 陶少辉¹ 杜增智² 项曙光^{1*}

(1. 青岛科技大学 化工学院, 青岛 266042; 2. 北京化工大学 化学工程学院, 北京 100029)

摘 要: 针对数字孪生场景中精馏塔严格逐板 MESH 模型存在的规模大、收敛性对初值敏感、在操作规定切换时需要重构方程组等问题,在改进 Edmister 模型(AEM)的基础上,提出一种包括冷凝器与再沸器的改进 AEM 全塔简捷模型(MAEM)及其配套的双层迭代柔性求解算法。MAEM 模型将冷凝器、再沸器与进料板的严格 MESH 方程组与塔段 AEM 模型显式纳入同一方程组,有效减小了模型规模。在所设计的双层求解算法中,内层在给定塔板温度下更新解吸因子并求解物料衡算;外层通过调节塔板温度满足任意两项规定,提升了非标准规定下的数值鲁棒性。以芳烃分离装置、宽沸程体系及气体分馏流程级装置为典型算例,将所提出的 MAEM 模型与原始 AEM 模型、Aspen Plus 软件中的 RadFrac 严格模型进行对比分析。结果表明:与 AEM 模型相比,MAEM 模型可通过直接灵活设置非常规操作规定项进行塔内计算,同时保持与 AEM 一致的计算精度和效率;与 RadFrac 模型相比,MAEM 模型关键操作参数的相对偏差均小于 5%,计算时间降低了约 31.6%~51%。MAEM 模型为涉及精馏过程的数字孪生部署提供了高效、稳健的建模与求解基础,较好提升了模型数字孪生的应用水平。

关键词: 精馏塔; 数字孪生; 简捷模型; 改进 Edmister 模型(AEM); 双层求解

中图分类号: TQ546 **DOI:** 10. 13543/j. bhhxbzr. 2026. 04. 005

引 言

随着数字孪生在流程工业应用中的不断深化,在线监测、预测与优化对精馏塔模型的实时性和鲁棒性提出了更高的要求^[1-2]。严格的精馏塔模型需同步求解大规模 MESH(material, equilibrium, summation, enthalpy)方程组,计算负担较重且对初值敏感^[3]。在数字孪生场景中,往往需要灵活配置非标准操作规定(例如蒸馏点、产品温度和组成的切

换),这会导致精馏塔模型发生改变,从而增加工程实现的复杂度并降低在线的可靠性^[4]。

精馏塔简捷模型被广泛应用于数字孪生中,可以实现快速仿真、在线优化和实时控制^[5]。Edmister^[6]和 Marchetti 等^[7]通过吸收因子与解吸因子对塔段传质强度进行了集总表征,将逐板计算转化为分段求解,可有效提高精馏塔建模的计算效率。Kamath 等^[8]进一步将泡点和露点方程纳入 Edmister 框架,提高了塔顶温度估计的准确性。Ecker 等^[9]提出了改进的 Edmister 模型(adapted Edmister model, AEM),创新性地进料和产品流通股所在塔板中引入严格的相平衡与能量平衡方程,其余塔板采用集总近似,并通过泡点/露点约束提高了塔板温度的预测能力。基于 AEM 的简捷模型具有较高的计算效率和良好的数值稳定性,适合集成到数字孪生框架中^[10-11],已成为目前相关领域的研究热点。但 AEM 在面向数字孪生

收稿日期:2026-02-01

基金项目:国家自然科学基金(22178190/22408195);山东省重点研发计划(2024CXGC010405);山东省化工过程模拟与优化工业软件重点实验室项目(PKL2024F23)

第一作者:男,1979年生,博士生

*通信联系人

E-mail: xsg@qust. edu. cn

应用时仍存在以下不足:1)AEM 主要采用分段建模与求解思路分别对精馏段与提馏段进行处理,难以形成统一的全塔方程框架;2)不支持非常规规定条件的塔内计算,仅能通过全局设计规定实现,限制了模型的适用性;3)数值收敛性对初值敏感,非标准规定下工程实施难度显著增大。

针对上述问题,本研究基于 AEM 提出了一种改进的统一全塔简捷模型(MAEM),通过将冷凝器、再沸器与进料板显式纳入同一控制方程组,实现统一的全塔方程框架。同时,配套开发了双层迭代柔性求解算法,设计了“内层物料衡算/解吸因子更新+外层规定满足”的双层迭代求解策略,可实现改进模型对非常规规定条件的支持并降低算法对初值的敏感性。最后,通过 3 类工业实际案例验证了所提改进模型与其配套求解算法的计算精度、计算效率、灵活性和稳定性。

1 AEM、MAEM 及双层迭代求解算法

1.1 AEM

Edmister^[6]采用吸收因子与解吸因子对塔段传质强度进行集总表征,将多组分精馏的逐板计算转化为塔段层面的代数关系。AEM 在保留中间段集总衡算的基础上,引入特定理论级的严格相平衡关系,拓展了原始模型的表述框架。图 1 为塔板级联模型及 AEM,其中 L 和 V 分别表示级联中塔板的液相摩尔流量和汽相摩尔流量,下标 $0, 1, \dots, N, N+1$ 表示对应的分离级。

对于图 1 的塔板级联,定义以下变量以建立精

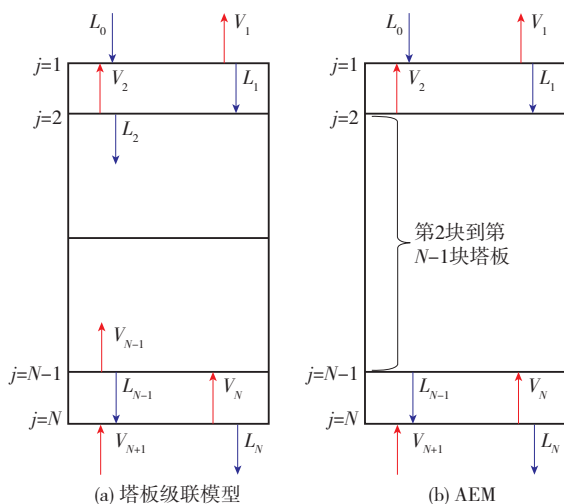


图 1 塔板级联模型及 AEM

Fig. 1 Tower plate cascade model and the AEM

馏区域的集总模型^[12]。

$$S_{i,j} = K_{i,j} V_j / L_j = v_{i,j} / l_{i,j}, j \in \{1, 2, \dots, N\}, i \in C \quad (1)$$

$$A_{i,j} = 1 / S_{i,j} = l_{i,j} / v_{i,j}, j \in \{1, 2, \dots, N\}, i \in C \quad (2)$$

式中: $S_{i,j}$ 与 $A_{i,j}$ 分别表示解吸因子与吸收因子,二者用于定量表征分离过程中物质在吸收与解吸方向上的传质强度; K 表示相平衡常数; v 表示组分汽相摩尔流量; l 表示组分液相摩尔流量; C 表示组分个数; 下标 i 和 j 分别表示组分和塔板序号。

由于塔段内各层塔板的汽液流量分布及各组分浓度通常未知,因此直接应用式(1)和(2)来逐板确定 $S_{i,j}$ 与 $A_{i,j}$ 的分布是不可行的。Edmister 提出式(3)和(4)的近似表达式,将解吸因子与吸收因子替换为其平均值,分别记作 $S_{e,i}$ 与 $A_{e,i}$ 。

$$S_{e,i} = \sqrt{S_{i,1}(S_{i,N} + 1) + 0.25} - 0.5, i \in C \quad (3)$$

$$A_{e,i} = \sqrt{A_{i,1}(A_{i,N} + 1) + 0.25} - 0.5, i \in C \quad (4)$$

采用相对解吸因子 $\phi_{s,i}$ 与相对吸收因子 $\phi_{A,i}$ 分别替代该级联中每块塔板上的吸收因子和解吸因子。

$$\phi_{s,i} = \frac{S_{e,i} - 1}{S_{e,i}^{N+1} - 1}, i \in C \quad (5)$$

$$\phi_{A,i} = \frac{A_{e,i} - 1}{A_{e,i}^{N+1} - 1}, i \in C \quad (6)$$

Ecker 等^[9]提出的适用于精馏塔的 AEM 模型表达式如式(7)~(14)所示。

$$T_j^V - T_j^L = 0, j = \{1, 2, \dots, N\} \quad (7)$$

$$H_{j+1}^V + H_{j-1}^L - H_j^V - H_j^L = 0, j = \{1, 2, \dots, N\} \quad (8)$$

$$v_{i,j+1} + l_{i,j-1} - v_{i,j} - l_{i,j} = 0, j = \{1, 2, \dots, N\} \quad (9)$$

$$v_{i,j} - S_{i,j} l_{i,j} = 0, j = \{1, 2, \dots, N\} \quad (10)$$

$$v_{i,2} = v_{i,N} \phi_{A,i} + l_{i,1} (1 - \phi_{s,i}) \quad (11)$$

$$l_{i,N-1} = l_{i,1} + v_{i,N} - v_{i,2} \quad (12)$$

$$T_{V_2} = T_{V_2}^{\text{dew}} \quad (13)$$

$$T_{L_{N-1}} = T_{L_{N-1}}^{\text{bubble}} \quad (14)$$

式中: T 表示温度, H 表示摩尔焓, 上标 V 和 L 分别表示汽相和液相, T_{V_2} 表示第 2 块板的汽相温度, $T_{V_2}^{\text{dew}}$ 表示第 2 块板的汽相露点温度, $T_{L_{N-1}}$ 表示第 $N-1$ 块板的液相温度, $T_{L_{N-1}}^{\text{bubble}}$ 表示第 $N-1$ 块板的液相泡点温度。

将式(10)和(11)结合,则平衡级的物料平衡方程和塔段的物料平衡方程可以完全用液相组分的摩尔流量来重新表述,从而得到式(15)。

$$\begin{bmatrix} \phi_{S,i} & -1 & (1 - \phi_{A,i})S_{i,N} \\ (\phi_{S,i} + S_{i,1}) & 0 & \phi_{A,i}S_{i,N} \\ 0 & 1 & -(S_{i,N} + 1) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} l_{i,1} \\ l_{i,N-1} \\ l_{i,N} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ l_{i,0} \\ -v_{i,N+1} \end{bmatrix} \quad (15)$$

式中:第一行和末行分别对应顶部和底部平衡级的新形式物料平衡方程,中间行表示中间区段的平衡方程。一旦首末两级的解吸因子($S_{i,1}$ 与 $S_{i,N}$)被设定,则通过求解公式(15)即可确定所有未知的液相组分流量。

1.2 MAEM

MAEM模型在AEM基础上,将整个精馏塔系统(包含冷凝器、进料板及再沸器)整合在单一建模体系内,如图2所示。其中,上标D和S分别表示精馏段和提馏段,Top、F和B分别表示塔顶、进料和塔底, j 表示该分段级联的第 j 块板。

通过AEM关系式将气相组分流量表达为液相组分流量的函数,全塔物料平衡可由式(16)表示。其中 R 表示回流比, f_i 表示进料摩尔流量, b_i 表示塔底采出摩尔流量。与传统的复杂精馏塔模型相比,MAEM模型仅在冷凝器、再沸器、进料位置和采出位置保留物料守恒,其余塔板按分离段处理,每个分离段仅包含式(15)所示的3个方程。对于该方程组,仅在主对角线及其相邻位置存在非零元

$$\begin{bmatrix} 1+1/R & -S_{i,1}^D & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -(S_{i,1}^D + \phi_{S,i}^D) & 0 & S_{i,N}^D \phi_{A,i}^D & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \phi_{S,i}^D & -1 & S_{i,N}^D (1 - \phi_{A,i}^D) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -(S_{i,N}^D + 1) & S_{i,F} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -(S_{i,F} + 1) & S_{i,1}^S & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -(S_{i,1}^S + \phi_{S,i}^S) & 0 & S_{i,N}^S \phi_{A,i}^S & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \phi_{S,i}^S & -1 & S_{i,N}^S (1 - \phi_{A,i}^S) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -(S_{i,N}^S + 1) & S_{i,B} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -(S_{i,B} + 1) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} l_{i,0} \\ l_{i,1}^D \\ l_{i,N-1}^D \\ l_{i,N}^D \\ l_{i,F} \\ l_{i,1}^S \\ l_{i,N-1}^S \\ l_{i,N}^S \\ b_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (16)$$

塔的馏出液流量和回流比可由精馏段第1块板的汽相采出量 V_1^D 和来自塔板级联上一块板的液相流量 L_0 的总流量得到,这两个参数可在所提出的简捷模型中直接确定。计算出液相和气相组分的摩

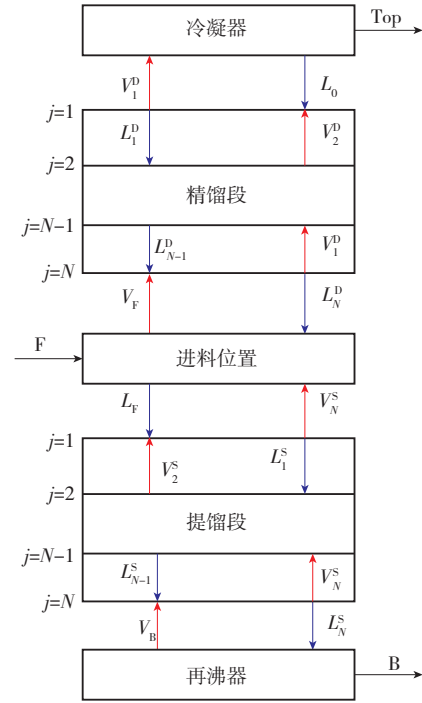


图2 MAEM模型

Fig. 2 MAEM model

素,因此可采用特殊类型矩阵的求解方法(如LU分解)进行求解,从而大幅降低了物料守恒方程组的计算规模,并提高了内层方程组的求解效率。一旦确定回流比与解吸因子(由此可计算出组分回收因子),则所有液相组分的摩尔流量可直接求解,继而通过式(10)和(11)直接计算气相流量,从而完成精馏塔的物料平衡建模。

尔流量后,利用露点或泡点相平衡计算来确定图2中物流精馏段和提馏段第2块板的汽相露点温度 $T_{V_2}^{\text{dew}}$ 和第 $N-1$ 块板的液相泡点温度 $T_{L_{N-1}}^{\text{bubble}}$ 。由于级间物流的总流量和组成已知,通过求解相应的焓平衡

方程可以确定除冷凝器和再沸器之外所有平衡级的温度。

图2中精馏区域顶部塔板的焓平衡可由式(17)表示,通过该式可求解其温度 T_1^D 。

$$H_{L_0}(T_0) + H_{V_2}(T_2^D) = H_{V_1}(T_1^D) + H_{L_1}(T_1^D) \quad (17)$$

式中: T_0 表示冷凝器或精馏段上方侧线采出板的温度, T_1 和 T_2 分别表示第1块和第2块塔板的温度,下标 V^D 和 L^D 分别表示精馏段的汽相和液相。

精馏区域底部塔板的温度 T_N^D 、进料板的温度 T_F 以及汽提区域顶部塔板的温度 T_1^S 可通过联立求解式(18)~(20)得到。

$$H_{L_{N-1}}(T_{N-1}^D) + H_{V_F}(T_F) = H_{V_N}(T_N^D) + H_{L_N}(T_N^D) \quad (18)$$

$$H_{L_N}(T_N^D) + H_{V_1}(T_1^S) = H_{L_F}(T_F) + H_{V_F}(T_F) \quad (19)$$

$$H_{L_F}(T_F) + H_{V_2}(T_2^S) = H_{L_1}(T_1^S) + H_{V_1}(T_1^S) \quad (20)$$

式中:下标 V_F 和 L_F 分别表示进料位置对应塔板的汽相和液相。

提馏区域底部塔板的温度 T_N^S 可由式(21)求得。

$$H_{V_{N+1}}(T_{N+1}^S) + H_{L_{N-1}^S}(T_{N-1}^S) = H_{L_N^S}(T_N^S) + H_{V_N^S}(T_N^S) \quad (21)$$

式中: T_{N+1} 为再沸器或提馏段下方侧线采出板的温度。

确定所有平衡级的温度后,可计算每个组分在各级的相平衡常数,进而计算解吸因子。

采用新框架后,无论采用何种操作参数组合,其控制方程结构始终保持一致。无论是将回流比、产品流量、塔板温度还是热负荷作为规定条件,均可沿用同一套物料与能量平衡方程,这个特性为模型参数的适应性提供了基础。

1.3 双层迭代柔性求解算法

统一全塔简捷模型在给定热力学参数时可归结为线性物料衡算,但解吸因子 S 与相平衡常数 K 的耦合使其整体仍为非线性代数方程组。为兼顾在线计算效率与收敛鲁棒性,本研究采用双层迭代策略,将“物料衡算求解/解吸因子更新”(内层)与“设计规定满足”(外层)进行解耦。

图3为双层柔性求解算法流程。首先以进料露点/泡点温度初始化塔板的液相流量 L_j 、汽相流量 V_j 、塔板温度 T_j 、冷凝器温度 T_C 、再沸器温度 T_B 、侧线温度 T_S 及气液相摩尔分数($x_{i,j}$ 、 $y_{i,j}$),同步更新解吸因子 $S_{i,j}$;然后启动内层循环,通过式(16)计算液相组分的摩尔流量 $l_{i,j}$,结合式(11)得到气相组分的摩尔流量 $v_{i,j}$ 。经焓平衡或泡露点更新塔板温度 T_j 与相组

成,计算相平衡常数 $K_{i,j}$ 并更新解吸因子为 $S'_{i,j}$ 。判断内层残差向量 E_{in} 是否满足内层容差 ε_{in} 的收敛要求,如未收敛则采用松弛更新解吸因子并进行循环。内层收敛后,进入外层循环。外层迭代以 T_C 与 T_B (必要时可扩展至 T_S)作为迭代变量,由式(22)更新操作规定变量 β_i 的计算值和设定值,得到外层残差向量 E_{out} 。判断 E_{out} 是否满足外层容差 ε_{out} 的收敛要求,如收敛则输出结果,否则重新进入内层循环。

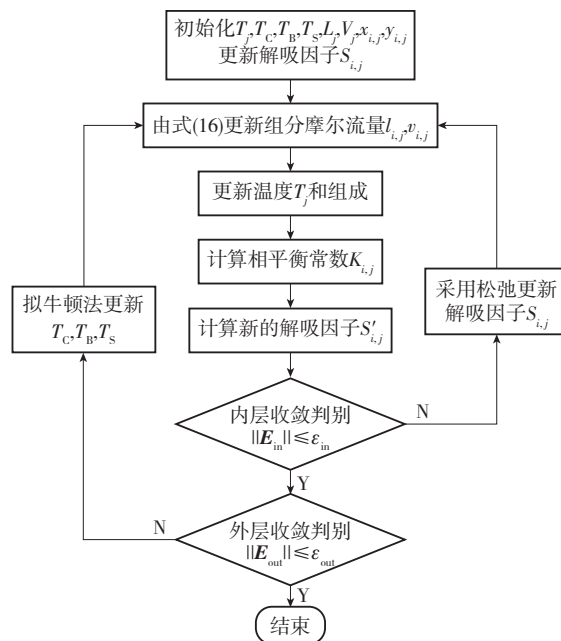


图3 双层迭代柔性求解算法流程

Fig. 3 Flowchart of the dual-layer iterative flexible solution algorithm

$$E_{out}(T_C, T_B) = \begin{bmatrix} E_1 \\ E_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta_1^{calc} - \beta_1^{spec} \\ \beta_2^{calc} - \beta_2^{spec} \end{bmatrix} \quad (22)$$

式中: β_1^{calc} 、 β_1^{spec} 分别表示操作规定变量1的计算值和设定值, β_2^{calc} 、 β_2^{spec} 分别表示操作规定变量2的计算值和设定值。

2 实例验证

2.1 验证方案

选取2个代表性精馏系统和1个流程级装置进行仿真实验,以验证所提MAEM模型的计算精度、效率和灵活性。所有案例中热力学方法均采用Peng-Robinson(PR)状态方程,所提MAEM模型和原始AEM模型在Visual Studio2022环境下采用C++语言实现,并基于自主开发的通用流程模拟软件OPEN进行流程建模。每个测试案例均采用以下两

个典型工况进行验证。

1) 工况 1

在标准操作规定下,通过对比 MAEM 模型与传统 AEM 模型、Aspen Plus 中的 RadFrac 严格模型(AR 模型)计算结果的相对偏差及计算耗时,验证 MAEM 模型的计算精度与效率优势。

2) 工况 2

聚焦非标准操作规定场景,重点验证 MAEM 模型的灵活性,同时与 AR 模型的计算结果进行对比,在证实 MAEM 模型操作灵活性的基础上,进一步保证其计算精度的可靠性与工程适用性。

2.2 验证案例

2.2.1 烃类系统案例

烃类系统选取某芳烃装置中用于分离 1,4-二乙苯的抽余液塔作为测试案例。工况 1 的进料设置见表 1,操作规定见表 2。工况 2 的进料设置与工况 1 相同(表 1),操作规定见表 3。AR 模型是在工况 1 下通过规定塔底 1,4-二乙苯的纯度并调节塔底馏出量而实现的。

表 1 芳烃装置中工况 1 和 2 的进料设置

项目	数值
温度/K	459.32
压力/kPa	921.33
质量流量/(kg·h ⁻¹)	99 605
x (苯)	5.95×10^{-4}
x (甲苯)	1.91×10^{-2}
x (邻二甲苯)	1.64×10^{-4}
x (间二甲苯)	3.70×10^{-4}
x (对二甲苯)	0.410
x (乙苯)	5.34×10^{-4}
x (1,2,3-三甲苯)	8.27×10^{-4}
x (甲基环己烷)	1.86×10^{-5}
x (五甲苯)	3.97×10^{-3}
x (邻二乙苯)	6.27×10^{-4}
x (间二乙苯)	4.84×10^{-3}
x (1,4-二乙苯)	0.559

x 表示各组分的摩尔分数。

2.2.2 宽沸程系统案例

为进一步验证所提模型在宽沸程系统中的适用性,选取催化裂化装置吸收稳定部分中的轻重汽

表 2 芳烃装置中工况 1 的操作规定

项目	数值或名称
塔板数	52
冷凝器类型	全凝器
冷凝器压力/kPa	121.33
整塔压降/kPa	50
塔底馏出量/(kg·h ⁻¹)	64 133
回流比	2.26
进料位置	第 22 块塔板

表 3 芳烃装置中工况 2 的操作规定

项目	数值或名称
塔板数	52
冷凝器类型	全凝器
冷凝器压力/kPa	121.33
整塔压降/kPa	50
塔底 1,4-二乙苯的摩尔分数	0.98
回流比	2.26

油分离塔作为测试案例。工况 1 的进料设置见表 4,操作规定见表 5,原油进料的蒸馏曲线(ASTM D86 标准)见图 4。工况 2 的进料设置与工况 1 相同(表 4),操作规定见表 6。AR 模型是在工况 1 下通过调节塔顶采出量来控制 T_{95} (塔底产品的体积分数为 95% 时的馏出温度)而实现的。

2.2.3 流程级装置案例

流程级装置案例选取某气体分馏装置作为研究对象,其工艺流程如图 5 所示。该装置包含 3 个精馏塔:脱丙烷塔 T1、脱乙烷塔 T2、丙烷/丙烯分离塔 T3。催化液化气进入 T1 塔,C4 组分从塔底馏出,较轻的 C2、C3 等组分从塔顶采出并进入 T2 塔。T2 塔顶采出乙烷,塔底的 C3 组分送入 T3 塔进一步提纯,产出产品丙烯。

工况 1 的进料流股组成见表 7,进料温度、压力、流量、进料位置及塔板数等参数设置见图 5,操作规定见表 8。工况 2 的进料设置与工况 1 相同(表 7 和图 5),操作规定见表 9。AR 模型是在工况 1 下实现的,其中 T1 塔通过调节回流比以及塔顶采出量 D 与进料量 F 之比(D/F)来控制塔顶异丁烷和塔底丙烷的组成,T2 塔通过调节回流比来控制塔底乙烷的组成,T3 塔通过调节回流比和 D/F 来控制塔顶丙烯和

表4 催化裂化装置中工况1和2的进料设置

Table 4 Feed settings for cases 1 and 2 in the catalytic cracking device

项目	数值
温度/K	359
压力/kPa	451.32
质量流量/(kg·h ⁻¹)	92 067
x (丙烷)	7.04×10^{-5}
x (丙烯)	1.66×10^{-4}
x (异丁烷)	5.07×10^{-3}
x (正丁烷)	3.19×10^{-3}
x (顺-2-丁烯)	8.07×10^{-3}
x (反-2-丁烯)	6.20×10^{-3}
x (异丁烯)	5.12×10^{-3}
x (1-丁烯)	3.77×10^{-3}
x (2-甲基丁烷)	5.44×10^{-2}
x (正戊烷)	4.50×10^{-4}
x (正己烷)	8.81×10^{-2}
x (原油)	0.825

x 表示各组分的摩尔分数。

表5 催化裂化装置中工况1的操作规定

Table 5 Operation regulations for case 1 in the catalytic cracking device

项目	数值或名称
塔板数	25
冷凝器类型	全凝器
冷凝器压力/kPa	187.32
整塔压降/kPa	16
塔顶采出量/(kg·h ⁻¹)	34 000
回流比	0.23
进料位置	第12块塔板

塔底丙烷的组成。

2.3 结果分析

2.3.1 计算精度

表10为不同模型对芳烃装置中工况1的计算结果对比。可以看出,MAEM与AEM模型的计算结果高度一致,相对偏差 δ_2 均在2%以内。与AR模型相比,MAEM模型的关键参数(如塔底温度、塔顶温度、塔底1,4-二乙苯和塔顶对二甲苯的摩尔分数)的相对偏差 δ_1 小于2%,仅少量次要组分(如塔顶甲苯、塔底对二甲苯)的摩尔分数的相对偏差略高,但

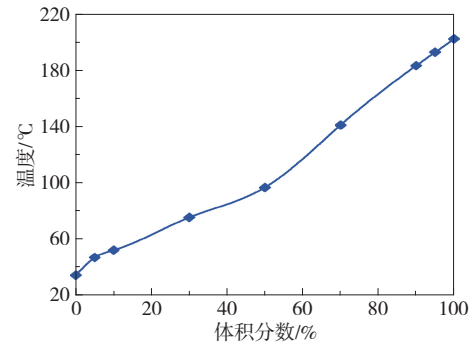


图4 原油进料的蒸馏曲线(ASTM D86标准)

Fig. 4 Distillation curve of the crude oil feed (in accordance with ASTM D86 standard)

表6 催化裂化装置中工况2的操作规定

Table 6 Operation regulations for case 2 in the catalytic cracking device

项目	数值或名称
冷凝器类型	全凝器
冷凝器压力/kPa	187.32
整塔压降/kPa	16
塔底产品的 $T_{95}/^{\circ}\text{C}$	468.15
回流比	0.23

仍在5%内。

表11为不同模型对催化裂化装置中工况1的计算结果对比,图6为不同模型下产品的蒸馏曲线(ASTM D86标准)。由表11可知,MAEM与AEM模型的计算结果基本一致,相对偏差 δ_2 均在3%以内。相较于AR严格模型,MAEM模型的关键参数(如温度、采出量等)的相对偏差 δ_1 均控制在0.5%以内,主要产物(如正己烷等)摩尔分数的计算结果与AR模型高度吻合, δ_1 基本保持在3%以内。由图6(a)可知,对于塔顶产品,MAEM模型生成的蒸馏曲线与AR模型几乎完全重合,精准捕捉到宽沸程体系中轻组分连续馏出的相变吸热特征。图6(b)显示,在塔底产品中,尽管在低体积分数区域(初馏点附近)MAEM与AR模型之间存在微小偏差,但随着馏出液体积分数增加,两条曲线逐渐趋于一致,整体走势高度契合。上述结果证明MAEM模型在处理具有显著非线性物性特征的宽沸程体系时,通过其特有的塔段集总表征方法,能够兼顾宏观分馏特性的预测精度与可靠性。

表12为不同模型对气体分馏装置中工况1的计算结果对比。结果表明,MAEM与AEM模型的计

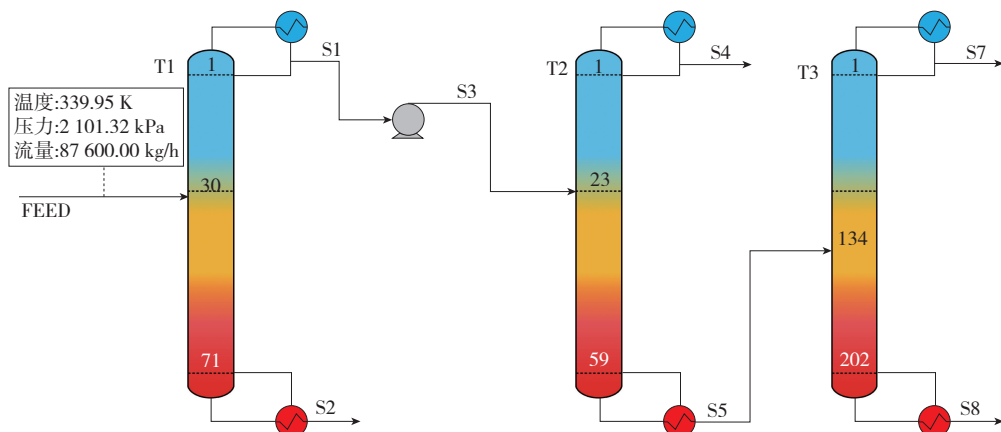


图 5 气体分馏装置工艺流程

Fig. 5 Process flow of the gas fractionation device

表 7 气体分馏装置中工况 1 和 2 的进料流股组成
Table 7 The composition of the feed stream for cases 1 and 2 in the gas fractionation device

组分	摩尔分数	组分	摩尔分数
甲烷	4.01×10^{-4}	1-丁烯	4.57×10^{-2}
乙烷	1.60×10^{-3}	异丁烯	4.88×10^{-2}
丙烷	0.156	顺-2-丁烯	2.41×10^{-2}
丙烯	0.409	2-甲基丁烷	8.01×10^{-4}
异丁烷	0.232	反-2-戊烯	3.02×10^{-4}
正丁烷	4.41×10^{-2}	正己烷	2.02×10^{-4}
反-2-丁烯	3.78×10^{-2}		

表 8 气体分馏装置中工况 1 的操作规定
Table 8 Operation regulations for case 1 in the gas fractionation device

项目	数值或名称		
	T1 塔	T2 塔	T3 塔
冷凝器类型	全凝器	部分汽相采 出,液相回流	全凝器
冷凝器压力/kPa	1 831.32	2 501.32	2 011.32
整塔压降/kPa	42	50	122
回流比	2.14	0.36	18.31
D/F	0.44	3.96×10^{-3}	0.65

算结果高度一致,相对偏差 δ_2 均在 2% 以内。与 AR 严格模型相比,MAEM 模型中各塔顶温度的相对偏差 δ_1 仅为 0.03%~0.06%,除塔顶丙烷摩尔分数(含量较低)的相对偏差较大($\delta_1=5.69\%$)外,其他指标的 δ_1 均在 2% 以内,满足工业模拟对于快速仿真精度的要求。

表 9 气体分馏装置中工况 2 的操作规定
Table 9 Operation regulations for case 2 in the gas fractionation device

项目	数值或名称		
	T1 塔	T2 塔	T3 塔
冷凝器类型	全凝器	部分汽相采 出,液相回流	全凝器
冷凝器压力/kPa	1 831.32	2 501.32	2 011.32
整塔压降/kPa	42	50	122
塔顶异丁烷的摩尔分数	0.000 6		
塔底乙烷的摩尔分数		0.000 1	
塔顶丙烯的摩尔分数			0.996
塔底丙烷的摩尔分数	0.000 2		0.985
D/F		0.003 96	

另外,在表 11 和表 12 中,相对于 AR 模型,MAEM 模型的部分非关键组分的摩尔分数表现出较高的相对偏差,例如表 11 中塔顶组分 PC100 ℃和塔底组分 PC59 ℃的摩尔分数的相对偏差 δ_1 分别达到 10.20% 和 7.67%,表 12 中 T1 塔顶组分丙烷的摩尔分数的 δ_1 为 5.69%。这主要是由简捷模型的内在集总特性决定的。MAEM 沿用了 AEM 的塔段集总近似思想,使用平均吸收/解吸因子表征塔段传质。对于宽沸程或高度非理想体系,塔板间的物性参数变化呈非线性,集总参数难以完美捕捉微量组分的局部非理想行为。由于这些非关键组分的摩尔分数很低,微小的绝对误差会导致较大的相对偏差。另外,针对宽沸程体系(催化裂化案例),由于其物质组成是对油品进行实沸点切割生成的虚拟组分,工业应用中通常更侧重于考察其

表10 不同模型对芳烃装置中工况1的计算结果对比

Table 10 Comparison of calculation results of different models for case 1 in the aromatic device

项目	数值			$\delta 1/\%$	$\delta 2/\%$
	AR	AEM	MAEM		
塔底馏出量/(kg·h ⁻¹)	64 133	64 133	64 133	0	0
回流比	2.26	2.26	2.26	0	0
塔顶温度/K	416.47	415.86	416.03	0.11	0.04
塔顶甲苯的摩尔分数	0.046 4	0.048 5	0.048 0	3.45	1.03
塔顶对二甲苯的摩尔分数	0.949 7	0.939 1	0.939 5	1.07	0.04
塔底温度/K	477.2	480.6	480.1	0.61	0.10
塔底压力/kPa	171.32	171.32	171.32	0	0
塔底对二甲苯的摩尔分数	0.032 6	0.034 0	0.033 7	3.37	0.88
塔底1,4-二乙苯的摩尔分数	0.950 0	0.940 0	0.943 2	0.72	0.34

$\delta 1$ 表示MAEM相对于AR的偏差, $\delta 2$ 表示MAEM相对于AEM的偏差。

表11 不同模型对催化裂化装置中工况1的计算结果对比

Table 11 Comparison of calculation results of different models for case 1 in the catalytic cracking device

项目	数值			$\delta 1/\%$	$\delta 2/\%$
	AR	AEM	MAEM		
塔顶采出量/(kg·h ⁻¹)	34 000	34 000	34 000	0	0
回流比	0.23	0.23	0.23	0	0
塔顶温度/K	323.13	322.87	322.82	0.1	0.02
x (异丁烷)	0.010 3	0.010 7	0.010 6	2.91	0.93
x (顺-2-丁烯)	0.016 3	0.016 9	0.016 7	2.45	1.18
x (反-2-丁烯)	0.012 5	0.012 2	0.012 1	3.20	0.82
x (异丁烯)	0.010 3	0.010 6	0.010 7	3.88	0.85
x (2-甲基丁烷)	0.109 4	0.103 7	0.104 0	4.94	0.29
x (正己烷)	0.104 0	0.106 5	0.106 2	2.12	0.28
x (PC26 °C)	0.518 6	0.527 1	0.525 9	1.41	0.23
x (PC59 °C)	0.091 7	0.095 0	0.094 3	2.84	0.74
x (PC72 °C)	0.059 8	0.056 1	0.057 0	4.68	1.60
x (PC86 °C)	0.031 6	0.030 5	0.030 8	2.53	0.98
x (PC100 °C)	0.014 7	0.012 9	0.013 2	10.20	2.33
塔底温度/K	413.85	415.74	415.68	0.44	0.01
塔底馏出量/(kg·h ⁻¹)	58 067	58 067	58 067	0	0
y (正己烷)	0.072 3	0.070 0	0.070 3	2.77	0.43
y (PC59 °C)	0.030 0	0.026 9	0.027 7	7.67	2.97
y (PC72 °C)	0.059 2	0.057 0	0.056 3	4.90	1.23
y (PC86 °C)	0.077 3	0.080 3	0.079 8	3.23	0.62
y (PC100 °C)	0.088 3	0.093 8	0.092 0	4.19	1.92
y (PC114 °C)	0.090 1	0.093 3	0.092 9	3.11	0.43
y (PC128 °C)	0.091 6	0.092 2	0.092 1	0.55	0.11
y (PC142 °C)	0.090 2	0.090 3	0.091 3	1.22	1.11
y (PC156 °C)	0.088 4	0.086 0	0.086 2	2.49	0.23
y (PC170 °C)	0.087 0	0.088 6	0.088 3	1.49	0.34
y (PC184 °C)	0.086 3	0.084 2	0.083 3	3.48	1.07
y (PC198 °C)	0.085 6	0.082 6	0.083 6	2.34	1.21
y (PC210 °C)	0.052 3	0.054 3	0.053 8	2.87	0.92

痕量组分没有对比价值,未列出; $\delta 1$ 表示MAEM相对于AR的偏差, $\delta 2$ 表示MAEM相对于AEM的偏差;以“PC”表示的组分为油品切割后的虚拟组分,其后的温度为该组分的沸点; x 表示塔顶组分的摩尔分数, y 表示塔底组分的摩尔分数。

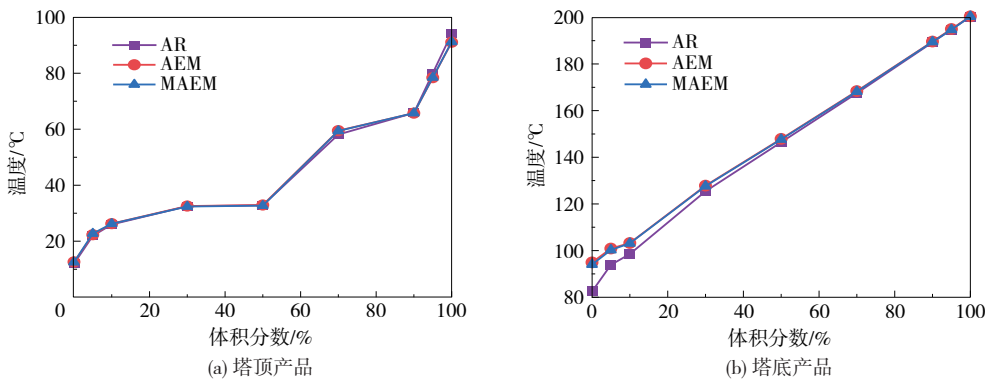


图6 不同模型下产品的蒸馏曲线(ASTM D86 标准)

Fig. 6 Distillation curves of the products of different models (in accordance with ASTM D86 standard)

表 12 不同模型对气体分馏装置中工况 1 的计算结果对比

Table 12 Comparison of calculation results of different models for case 1 in the gas fractionation device

精馏塔	项目	数值			$\delta 1/\%$	$\delta 2/\%$
		AR	AEM	MAEM		
T1	塔顶温度/K	322.12	322.1	322.3	0.06	0.06
	塔顶采出量/($\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$)	33 600	33 579	33 579	0.06	0
	塔底馏出量/($\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$)	54 000	54 021	54 021	0.04	0
	塔顶丙烷的摩尔分数	0.235 7	0.225 6	0.222 3	5.69	1.46
	塔顶丙烯的摩尔分数	0.759 7	0.768 6	0.773 1	1.76	0.59
T2	塔顶温度/K	332.29	332.21	332.19	0.03	0.01
	塔顶采出量/($\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$)	168.25	168.09	168.09	0.10	0
	塔底馏出量/($\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$)	42 998	42 998	42 998	0	0
	塔底丙烷的摩尔分数	0.274 5	0.275 6	0.275 7	0.44	0.04
	塔底丙烯的摩尔分数	0.721 1	0.720 2	0.720 6	0.07	0.06
T3	塔顶温度/K	318.48	318.39	318.40	0.03	0
	塔顶采出量/($\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$)	27 700	27 696	27 696	0.01	0
	塔底馏出量/($\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$)	15 349	15 353	15 353	0.03	0
	塔顶丙烯的摩尔分数	0.995 7	0.997 9	0.998 6	0.29	0.07
	塔底丙烷的摩尔分数	0.784 3	0.789 7	0.787 2	0.37	0.32
	塔底丙烯的摩尔分数	0.213 6	0.208 2	0.209 8	1.78	0.77

表中只列出关键组分和关键参数;痕量组分没有对比价值,未列出; $\delta 1$ 表示 MAEM 相对于 AR 的偏差, $\delta 2$ 表示 MAEM 相对于 AEM 的偏差。

宏观的蒸馏曲线,而非单一虚拟组分的精确浓度。尽管个别虚拟组分(如塔顶组分 PC100 ℃和塔底组分 PC59 ℃)的摩尔分数的相对偏差 $\delta 1$ 较大,但结合图 6 的蒸馏曲线可知,MAEM 与 AR 模型的塔顶产品蒸馏曲线基本重合,塔底产品蒸馏曲线也仅在初馏点附近存在微小偏离,随后两条曲线趋于一致,说明其宏观物性计算结果高度可靠。考虑到数字孪生场景主要关注关键组分纯度及宏观

能耗指标的在线追踪,MAEM 模型对非关键组分的预测精度已充分满足工业实时计算与在线优化的需求,明确了其作为快速仿真替代模型的良好适用边界。

2.3.2 计算效率

图 7 为不同模型对工况 1 和 2 的计算时间对比。由图 7(a)可知:在工况 1 中,MAEM 与 AEM 的计算时间十分相近,展现出一致的计算加速效果;对于

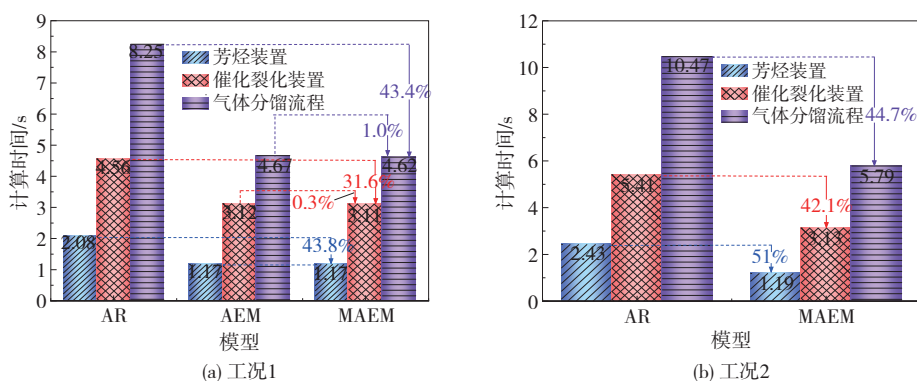


图7 不同模型对工况1和2的计算时间对比

Fig. 7 Comparison of calculation time of different models for case 1 and 2

芳烃装置、催化裂化装置和气体分馏流程级装置, MAEM的计算时间相比AR分别减少了43.8%、31.6%和43.4%。由图7(b)可知:在工况2中,对于芳烃装置、催化裂化装置和气体分馏流程级装置, MAEM的计算时间相比AR分别减少了51%、42.1%和44.7%。虽然MAEM和AEM模型相比严格模型AR均具有显著的计算加速效果,但是在切换工况时MAEM相比AEM模型更具有高效性。

2.3.3 灵活性

表13为AR与MAEM模型对工况2的计算结果对比。结果显示,在工况2下,除气体分馏装置中T1、T3精馏塔的回流比指标的相对偏差较大外,MAEM模型的其他主要指标的相对偏差均控制在5%以内。MAEM模型能够灵活规定组分组成、蒸馏点及塔板温度等各类非常规操作的条件,而原始AEM模型仅能通过全局设计规定实现相关规定的设置,表明MAEM在规规定设置方面具有显著的灵活性优势。

针对T1和T3塔的回流比指标偏差较大的问题,本研究以回流比为调节变量,两个塔的规定指标(T1中塔顶异丁烷和塔底丙烷的摩尔分数,T3中塔顶丙烯和塔底丙烷的摩尔分数)为目标变量,进行了灵敏度分析,结果如图8所示。结果显示,两个塔的规定指标对回流比变化表现出极低的敏感性,反之说明回流比对规定指标变化高度敏感,规定指标的微小波动会导致回流比出现明显的变化。这一现象表明,在极高纯度分离工况下,简捷模型MAEM的微小热力学计算误差会被显著放大,导致回流比(能耗指标)出现较大偏差。但考虑到数字孪生场景的核心诉求是快速追踪组分纯度趋势,而非精确核定绝对能耗,因此该模型依然具有良好的

工程实用价值。

2.3.4 收敛稳定性

为了验证MAEM算法的收敛稳定性,在芳烃装置和催化裂化装置两个案例的工况1下,比较了MAEM与AR模型在不同初值(冷凝器温度 T_c 与再沸器温度 T_b)下的收敛行为,结果见表14。芳烃装置案例的收敛结果为: $T_c=416.56\text{ K}$, $T_b=479.59\text{ K}$;催化裂化装置案例的收敛结果为: $T_c=323.13\text{ K}$, $T_b=413.85\text{ K}$ 。由表14可以看出,当初值偏离收敛结果值较大时,AR模型出现不收敛情况;而初值变化对MAEM模型的影响较小,仅当初值偏离收敛结果较大时,MAEM模型的迭代次数略微增大,并且在严重偏离收敛结果的情况下仍然能够保持收敛,这说明MAEM算法能够有效降低对初值的敏感性。

3 结论

(1)提出基于AEM的统一全塔数字孪生简捷模型MAEM。将冷凝器、进料板与再沸器显式纳入单一控制方程组,通过AEM关系式将气相组分流量表示为液相组分流量的函数,使全塔物料衡算可重写为与塔板数无关的线性方程组,从而显著降低了模型规模与计算负担。

(2)设计了“内层物料衡算+外层温度调节”的双层迭代柔性求解策略。该算法通过将热力学参数更新与操作规定满足问题进行解耦,能够灵活支持各类非常规操作规定组合(如蒸馏点、产品温度和组分组成等)的快速求解,为数字孪生部署提供统一的调用接口;同时,相比于Aspen RadFrac严格模型,该策略有效降低了数值计算对初值的敏感性,提升了在极端工况与频繁规定切换下的收敛可靠性与工程实用性。

表 13 AR 与 MAEM 模型对工况 2 的计算结果对比
Table 13 Comparison of calculation results of AR and MAEM models for case 2

案例	规定	项目	数值		$\delta/\%$
			AR	MAEM	
芳烃装置	规定一	塔底 1,4-二乙苯的摩尔分数	0.98	0.98	0
	规定二	回流比	2.26	2.26	0
		塔底馏出量/(kg·h ⁻¹)	62 471.34	62 569.50	0.16
		塔顶温度/K	416.55	415.96	0.14
		塔顶甲苯的摩尔分数	0.044 329	0.045 94	3.63
		塔顶对二甲苯的摩尔分数	0.951 765	0.950 100	0.17
催化裂化装置	规定一	塔底产品的 $T_{95}/^{\circ}\text{C}$	468.15	468.15	0
	规定二	回流比	0.23	0.23	0
		塔顶采出量/(kg·h ⁻¹)	35 068.29	35 020.00	0.14
		塔顶温度/K	323.76	323.59	0.05
		塔顶 2-甲基丁烷的摩尔分数	0.106 8	0.107 0	0.19
		塔顶正己烷的摩尔分数	0.110 0	0.114 8	4.36
		塔顶虚拟组分 PC26 $^{\circ}\text{C}$ 摩尔分数	0.506 3	0.506 9	0.12
气体分馏装置 T1 塔	规定一	塔顶异丁烷的摩尔分数	0.000 6	0.000 6	0
	规定二	塔底丙烷的摩尔分数	0.000 2	0.000 2	0
		回流比	1.95	2.31	18.46
		D/F	0.57	0.57	0
		塔顶丙烷的摩尔分数	0.275	0.274	0.36
		塔顶丙烯的摩尔分数	0.721	0.722	0.14
气体分馏装置 T2 塔	规定一	塔底乙烷的摩尔分数	0.000 1	0.000 1	0
	规定二	D/F	0.003 96	0.003 96	0
		回流比	228.80	218.55	4.48
		塔顶温度/K	278.41	279.53	0.40
		塔底丙烷的摩尔分数	0.275 6	0.275 6	0
		塔底丙烯的摩尔分数	0.723 5	0.723 5	0
气体分馏装置 T3 塔	规定一	塔顶丙烯的摩尔分数	0.996 0	0.996 0	0
	规定二	塔底丙烷的摩尔分数	0.985 0	0.985 1	0
		回流比	18.98	22.15	16.70
		D/F	0.723	0.723	0
		塔顶丙烷的摩尔分数	0.003 86	0.003 83	0.78
		塔底丙烯的摩尔分数	0.012 4	0.012 3	0.81

δ 表示 MAEM 相对于 AR 的偏差。

(3)工业案例测试结果表明:MAEM 模型在灵活实现非标准规定下塔内迭代计算的同时保持与 AEM 相同的计算精度和求解效率;相对于 Aspen RadFrac 严格模型,MAEM 模型关键参数的偏差较

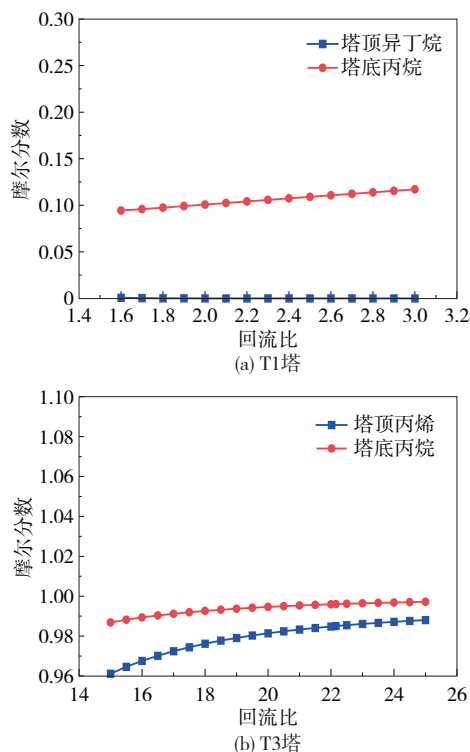


图8 气体分馏装置中T1与T3塔的灵敏度分析结果

Fig. 8 Sensitivity analysis results for the T1 and T3 towers in the gas fractionation device

表14 AR与MAEM模型在不同初值下收敛所需的迭代次数
Table 14 The number of iterations required for convergence of AR and MAEM models for different initial values

案例	T_c/K	T_b/K	迭代次数	
			AR	MAEM
芳烃装置	416	479	5	27
	400	500	4	23
	380	520	5	19
	300	500	不收敛	35
	200	600	不收敛	31
催化裂化装置	323	413	14	45
	380	520	23	44
	300	550	38	37
	250	650	不收敛	51
	200	600	不收敛	58

小,最大相对偏差不超过5%,并且计算时间大幅减少,计算效率提高了约31.6%~51%。

参考文献:

[1] PETERSON L, GOSEA I V, BENNER P, et al. Digital

twins in process engineering: an overview on computational and numerical methods[J]. Computers & Chemical Engineering, 2025, 193: 108917.

- [2] ILIUȚĂ M E, MOISESCU M A, POP E, et al. Digital twin—a review of the evolution from concept to technology and its analytical perspectives on applications in various fields[J]. Applied Sciences, 2024, 14(13): 5454.
- [3] BIASI L C K, HEINKENSCHLOSS M, BATISTA F R M, et al. A new unified model to simulate columns with multiple phase divisions and their impact on energy savings[J]. Computers & Chemical Engineering, 2020, 140: 106937.
- [4] SKOGESTAD S. The dos and don'ts of distillation column control[J]. Chemical Engineering Research and Design, 2007, 85(1): 13–23.
- [5] KENDER R, KAUFMANN F, RÖBLER F, et al. Development of a digital twin for a flexible air separation unit using a pressure-driven simulation approach[J]. Computers & Chemical Engineering, 2021, 151: 107349.
- [6] EDMISTER W C. Absorption and stripping-factor functions for distillation calculation by manual- and digital-computer methods[J]. AIChE Journal, 1957, 3(2): 165–171.
- [7] MARCHETTI A G, AMRHEIN M, MARCHETTI P A, et al. A shortcut model for batch distillation columns using pertinent effective factors[J]. Chemical Engineering Science, 2025, 304: 120978.
- [8] KAMATH R S, GROSSMANN I E, BIEGLER L T. Aggregate models based on improved group methods for simulation and optimization of distillation systems[J]. Computers & Chemical Engineering, 2010, 34(8): 1312–1319.
- [9] ECKER A M, THOMAS I, HÄFELE M, et al. Development of a new column shortcut model and its application in process optimisation[J]. Chemical Engineering Science, 2019, 196: 538–551.
- [10] KENDER R, STOPS L, KRESPACH V, et al. Reduced order modeling of a pressure column of an air separation unit using the Dynamic Edmister Method[J]. Computers & Chemical Engineering, 2023, 174: 108250.
- [11] LÜTHJE J T, SCHULZE J C, CASPARI A, et al. Adaptive learning of hybrid models for nonlinear model predictive control of distillation columns[J]. IFAC-PapersOnLine, 2021, 54(3): 37–42.
- [12] EDMISTER W C. Design for hydrocarbon absorption and stripping[J]. Industrial & Engineering Chemistry, 1943, 35(8): 837–839.

A shortcut digital twin model for flexible distillation towers based on the adapted Edmister model (AEM)

ZHAO Jun¹ SUN XiaoYan¹ TAO ShaoHui¹ DU ZengZhi² XIANG ShuGuang^{1*}

(1. College of Chemical Engineering, Qingdao University of Science and Technology, Qingdao 266042;

2. College of Chemical Engineering, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China)

Abstract: The strict plate MESH model of the distillation column in the digital twin scenario suffers from problems such as large scale, sensitivity of convergence to initial values, and the need to reconstruct the equation system when switching operation regulations. In light of these problems, a modified AEM full-tower shortcut model (MAEM) including a condenser and a reboiler, along with its corresponding double-layer iterative flexible solution algorithm, is proposed based on the adapted Edmister model (AEM). The MAEM model explicitly incorporates the strict MESH equations for the condenser, reboiler and feed plate, as well as the AEM model for the tower section, into a single equation set, effectively reducing the model size. In our double-layer solution algorithm, the inner layer updates the desorption factor and solves the material balance for the given tower plate temperature. The outer layer adjusts the tower plate temperature to meet any two specified requirements, thereby enhancing the numerical robustness under non-standard conditions. Using the aromatic hydrocarbon separation device, the wide boiling range system, and the gas fractionation process level device as typical examples, our MAEM model was compared with the original AEM model and the RadFrac strict model in Aspen Plus. The results show that the MAEM model can perform internal tower calculations by directly and flexibly setting unconventional operation parameters, while maintaining the same calculation accuracy and efficiency as the AEM model. Compared with the RadFrac model, the relative deviations of the key operational parameters of the MAEM model are all less than 5%, and the calculation time has been reduced by approximately 31.6% to 51%. Our MAEM model provides an efficient and robust framework for the deployment of digital twins in distillation processes, significantly enhancing the application potential of these digital twins.

Key words: distillation tower; digital twin; shortcut model; adapted Edmister model (AEM); two-layer solution

(责任编辑:于少云)