

糠醛水溶液错流和逆流萃取分离的模拟计算

顾正桂, 毛梅芳, 林军, 司玲

(南京师范大学化学与环境科学学院, 210097, 南京)

[摘要] 选择 1, 1, 1-三氯乙烷为糠醛和水萃取分离的溶剂, 建立错流和逆流模拟计算框图, 采用试差法模拟错、逆流分离结果. 模拟结果表明, 1, 1, 1-三氯乙烷是糠醛和水分离的有效溶剂; 在 $N = 3$ 时, 萃取分离后糠醛含量达 99% 以上, 萃余液中糠醛含量可降至 0.07% 以下. 模拟结果为进一步工业化试验提供了理论依据.

[关键词] 模拟计算, 糠醛和水, 错流, 逆流

[中图分类号]TQ251; TQ028.1⁺3, [文献标识码]B, [文章编号]1672-1292-(2003)02-0015-04

0 引言

近年来, 国内外许多研究人员致力于从糠醛水溶液中分离糠醛的研究^[1~3]. 本文在以往研究^[4,5]的基础上, 以 1, 1, 1-三氯乙烷为萃取剂, 采用 UNIQUAC 方程为平衡计算模型, 建立错流和逆流模拟计算框图, 模拟计算常温、常压下萃取分离结果, 为工业化试验提供理论依据.

1 错流萃取模拟计算

1.1 工艺方案及模拟计算框图

设计了如图 1 所示的错流萃取工艺流程, 图中每个萃取器包括使原料液和萃取剂充分搅拌, 并分层分离. 原料液在第一级萃取器中与萃取剂充分搅拌, 并分层分离; 萃取剂处理后的萃余相 R_1 , 继续在第二级中被新鲜的萃取剂所萃取, 使第二次萃取相 R_2 中的溶质浓度进一步降低. 依此, 直至第 N 级的萃余相 R_N 的浓度低于指定值. 由各个萃取级所得的萃余相 E_1 、 E_2 、..... E_N , 汇总后送精馏塔分离, 精馏塔顶溶剂 S 循环使用; 塔底

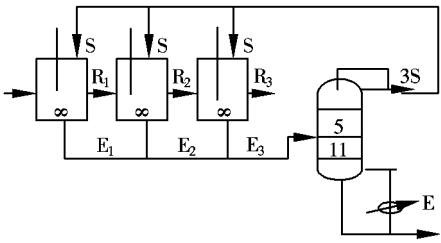


图 1 错流萃取分离糠醛和水的工艺的流程示意图

1.2 错流模拟计算结果

设原料加入量 $F = 60$ mL, 水、糠醛含量(Z_1 , Z_2)分别为 0.952 5、0.047 5, $Z_3 = 0$, 萃取剂 S 为 20 mL, 萃取相 E 和萃余相 R 在每级萃取器中组成服从关系式(1), 式中活度系数 r_i 、 r_i^* 采用 UNIQUAC 计算, 模型中参数由文献[6]查知.

$$X_{(i,N)} \cdot r_{(i,N)} = X_{(i,N)}^* \cdot r_{(i,N)}^* \quad (i = 1, 2, 3) \tag{1}$$
$$X_{(i,N)} = (Z_i - \beta(N) \cdot X_{(i,N)}) / (1 - \beta(N)) \quad (i = 1, 2, 3) \tag{2}$$
$$K_{(i,N)} = r_{(i,N)} / r_{(i,N)}^* \tag{3}$$
$$f(\beta(N)) = \sum_{i=1}^3 Z_i / [\beta(N) + K_{(i,N)}(1 - \beta(N))] - 1 \tag{4}$$

收稿日期: 2002-12-11.
基金项目: 江苏省应用基础研究课题(DJ95129)资助.
作者简介: 顾正桂, 1962-, 南京师范大学化学与环境科学学院教授, 香港远程教育学院终身教授, 主要从事化工工艺及分离技术的研究.

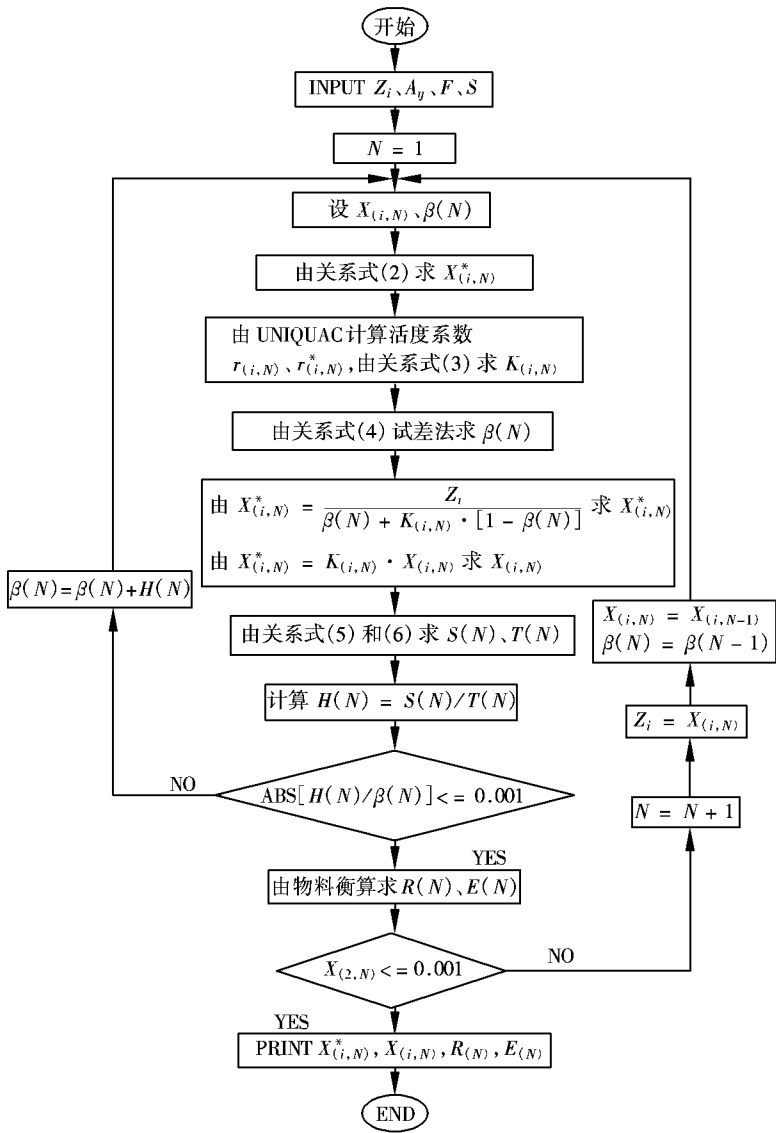


图2 错流萃取模拟计算框图

$$S = \sum_{i=1}^3 Z_i (K_{(i,N)} - 1) / [1 + (K_{(i,N)} - 1) \beta(N)] \tag{5}$$

$$T = \sum_{i=1}^3 Z_i (K_{(i,N)} - 1) / [1 + (K_{(i,N)} - 1) \beta(N)]^2 \tag{6}$$

表 1 表明, 以 1, 1, 1-三氯乙烷为萃取剂, 采用图 2 所示模拟框图计算萃取分离过程, 在 $N = 3$ 时, 糠醛收率达 99%, 纯度可达 99%(质量分率) 以上.

表 1 298.2 K 情况下计算机模拟错流萃取分离结果/mL

次数	原料	溶剂	一次萃取		二次萃取		三次萃取	
			E ₁	R ₁	E ₂	R ₂	E ₃	R ₃
溶剂	(F)	(S)						
流量	6.040 2	2.932 6	3.170 6	5.823 7	3.147 7	5.748 0	2.985 4	5.429 5
水	0.952 5	0.000 0	0.000 3	0.987 0	0.000 3	0.995 9	0.000 2	0.998 0
糠醛	0.047 5	0.000 0	0.069 0	0.011 6	0.016 5	0.002 7	0.004 2	0.000 5
三氯乙烯	0.000 0	1.000 0	0.930 7	0.001 4	0.983 2	0.001 4	0.995 6	0.001 5

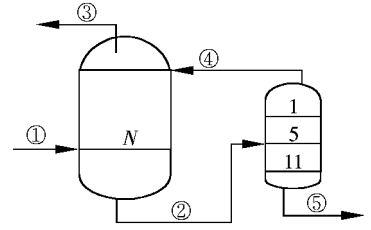
2 逆流萃取模拟计算

2.1 工艺方案及模拟计算框图

设计了如图 3 所示的逆流萃取工艺流程图, 图中塔顶为萃余相, 塔底为富含糠醛的萃取相, 萃取相送精馏塔分离, 精馏塔顶溶剂循环使用, 塔底可一次得到高纯度糠醛。

2.2 逆流模拟计算结果

原料组成同于错流萃取所用原料组成, 在 298.2 K 条件下, 采用图 4 所示模拟框图计算分离结果, 萃余相和萃取相组成见表 2。在 $N = 3$, 原料与萃取剂流量比为 3: 1.2 时, 萃余液中糠醛可降至 0.07%, 糠醛收率达 98.4%, 萃取相经精馏塔分离后, 糠醛纯度达 99.2%。



①原料液, ②萃取相, ③萃余相,

④溶剂, ⑤高纯度糠醛

图 3 逆流萃取工艺流程示意图

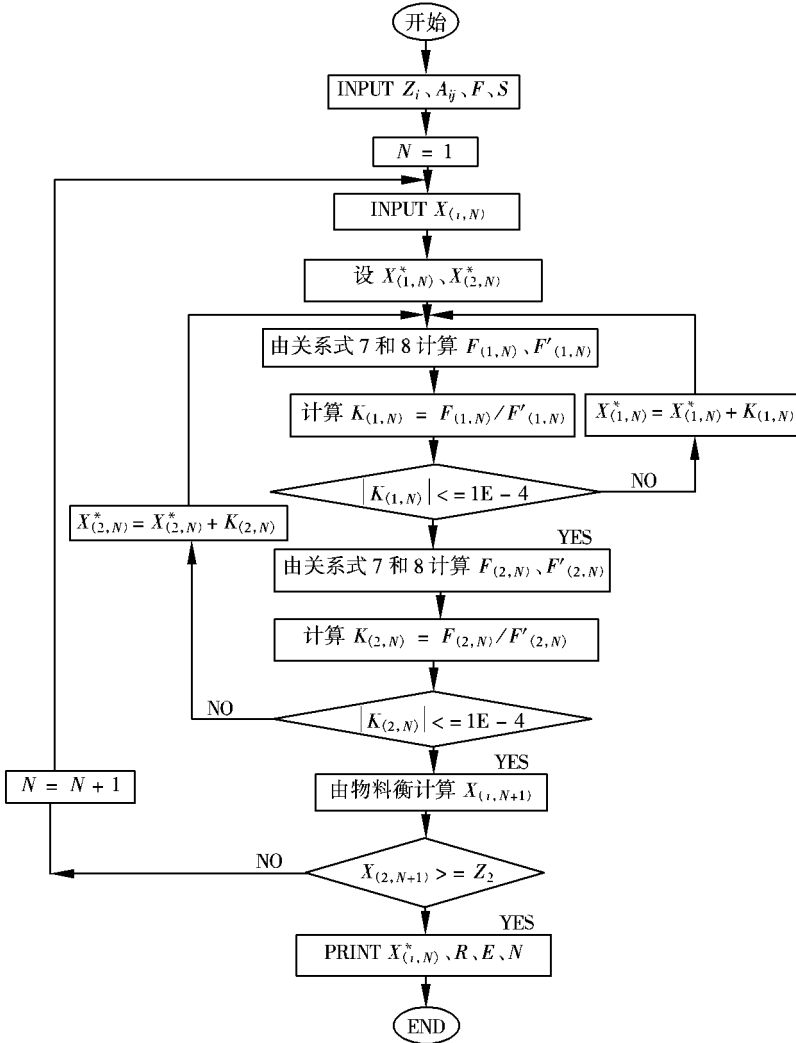


图 4 逆流萃取模拟计算框图

$$F_{(i,N)} = X_{(i,N)} \cdot r_{(i,N)} - X_{(i,N)}^* \cdot r_{(i,N)}^* \quad (i = 1, 2, 3) \quad (7)$$

$$F'_{(i,N)} = \left. \frac{\partial F_{(i,N)}}{\partial X_{(i,N)}^*} \right|_{X_{(j,N)}^*} \quad (i \neq j) \quad (8)$$

表 2 298.2 K 情况下, $N=3$ 时模拟计算逆流萃取分离结果

原料流量/ 溶剂流量/ (kg/h) (kg/h)			萃余相(R) 及组成(wt %)			萃取相(E) 及组成(wt %)			
流量/(kg/h)	水	糠醛	1, 1, 1-三氯乙烷	流量/(kg/h)	水	糠醛	1, 1, 1-三氯乙烷		
3.0210	0.9967	2.8752	0.9989	0.0011	0.0000	1.1425	0.0034	0.1242	0.8724
3.0210	1.3290	2.8749	0.9991	0.0009	0.0000	1.4751	0.0025	0.0966	0.9009
3.0210	1.5948	2.8746	0.9993	0.0007	0.0000	1.7412	0.0019	0.0822	0.9159
3.0210	1.9935	2.8742	0.9996	0.0004	0.0000	2.1403	0.0014	0.0672	0.9314

3 结论

以 UNIQUAC 方程为模型, 采用微机模拟计算糠醛和水的错流和逆流萃取分离结果, 模拟结果表明 1, 1, 1-三氯乙烷是糠醛和水分离的有效溶剂; 在 $N=3$ 时, 萃取分离后糠醛含量达 99% 以上, 萃余液中糠醛含量可降至 0.07% 以下, 模拟结果为进一步工业化试验提供理论依据.

符号说明

$A_{ij} (i=1, 2, 3; j=1, 2, 3)$	UNIQUAC 方程中相互作用参数
E, R	萃取相和萃余相流量(kg/h)
F, S	原料和溶剂加入量(kg/h)
$K_{(i,N)} (i=1, 2, 3)$	分配系数
N	塔板数(萃取次数)
$S(N), T(N)$	目标函数一次、二次导数
$X_{(i,N)}, X_{(i,N)}^* (i=1, 2, 3)$	萃余相和萃取相组成(wt %)
$Z_i (i=1, 2, 3)$	原料总组成(wt %)
$\beta(N)$	相分配系数
$r_{(i,N)}, r_{(i,N)}^*$	萃余相和萃取相各组分的活度系数

[参考文献]

[1] Naulik s. k. Extraction Solvents for furfural and water[J]. India Res ind, 1989, 34(3) : 205.
[2] 刘俊峰. 糠醛产品萃取分离的研究[J]. 化学工业与工程, 2000, 17(5) : 303.
[3] 顾正桂. 溶剂比对糠醛水溶液分离的影响[J]. 化学工业与工程, 1996, 13(1) : 13.
[4] 顾正桂. 水溶液中糠醛的抽提方法[J]. 南京师范大学学报(工程技术版), 2002, 2(1) : 48.
[5] 顾正桂. 逆流萃取抽提水溶液中糠醛[J]. 吉林化工学院学报, 2002, 19(3) : 8.
[6] 韩世钧译. 化工相平衡[M]. 北京: 中国石化出版社, 1991.

Simulation Calculation for Cross-current
and Counter-flow Extraction Separation of Furfural and Water

Gu Zhenggui, Mao meifang, Lin Jun, Si Ling

(College of Chemistry and Environmental Science, Nanjing Nomal University, 210097, Nanjing, PRC)

Abstract: 1, 1, 1-Trichloroethane was selected as a solvent for the extraction separation of furfural-water system. The theoretical results of cross-current and counter-flow were obtained by simulation calculation. The results show that 1, 1, 1-trichloroethane is an effective solvent for the extraction process. The recovery of furfural after extraction with $n=3$ was up to 99% (wt.) and furfural in water layer was reduced to < 0.07%. The simulation results will provide theoretical bases for further industrial testing.

Key words: simulation calculation, furfural-water system, cross-current, counter-flow

[责任编辑: 严海琳]