

机器学习驱动的多塔级联精馏优化 氘水升级处理工艺

杨霞¹, 主炳鑫², 熊小红^{1,*}, 张旭斌², 李国兵²

1. 中核核电运行管理有限公司, 浙江 嘉兴 314300; 2. 天津大学 化工学院, 天津 300072

摘要: 氘水(D₂O)作为一种重要的化学原料,在核能领域中具有不可替代的作用,尤其作为核反应堆中的中子慢化剂,其需求日益增长。采用水精馏级联工艺进行氘水浓缩时,由于D₂O与H₂O的蒸汽压差异较小,通常需要较高的回流比(50~200),从而导致系统能耗和运行成本显著增加。此外,传统级联实验成本高昂,且多操作参数强耦合的特性使得同位素分布规律难以系统分析。因此,更有效地控制关键操作参数对于优化生产设计和实现成本控制具有重要意义。本研究构建了二塔级联水精馏耦合热泵的新工艺,并提出了基于反向传播(BP)人工神经网络的优化预测模型。该模型利用2085组模拟数据进行训练,以塔板数、压缩比和循环工质流量为输入变量,实现了对氘水纯度、节能效率及总费用的精确预测。结果表明,模型预测值与模拟值高度吻合,相关系数(R)均超过0.999。进一步采用Garson和Yoon算法进行的灵敏性分析表明,压缩比是影响节能效率的首要因素,而回流比则对氘水纯度和总费用影响较为显著。研究提出,应优先提高压缩比以降低能耗,并选择较高的回流比以平衡设备与运行成本。总体而言,本研究验证了机器学习方法可作为复杂精馏过程的高效优化工具,为操作条件的快速筛选与优化提供可靠依据,并为氘水及类似复杂分离过程的工程设计与运行优化提供了新的技术路径。

关键词: 机器学习; D₂O 提纯; 多塔级联; 优化设计

中图分类号: TQ028.3

文献标志码: A

文章编号: 0253-9950(2026)01-0058-10

doi: 10.7538/hhx.2026.48.01.0058

Machine Learning-Driven Optimization of Deuterium Water Upgrading Process Using Multi-Tower Cascade Distillation

YANG Xia¹, ZHU Bingxin², XIONG Xiaohong^{1,*}, ZHANG Xubin², LI Guobing²

1. CNNC Nuclear Power Operations and Management Co. Ltd., Jiaxing 314300, China;

2. School of Chemical Engineering and Technology, Tianjin University, Tianjin 300072, China

Abstract: Deuterium water(D₂O) is an essential chemical material widely used in the nuclear energy field, particularly as a neutron moderator in nuclear reactors, and it also plays an important role in medical, biological, and chemical research. D₂O concentration by a water distillation cascade process, however, due to the extremely small vapor pressure difference between D₂O and H₂O, very high reflux ratios(typically ranging from 50 to 200) are required. This results in substantial energy consumption and elevated operating

收稿日期: 2025-02-17; 修订日期: 2025-05-08

基金项目: 国家自然科学基金项目(22479109)

* 通信联系人: 熊小红

costs. In addition, traditional cascade experiments are expensive and difficult to conduct, and the complex coupling among multiple operating parameters makes it challenging to comprehensively observe isotope distribution and identify optimal operating conditions. Consequently, more effective control of key operating parameters is of great significance for optimizing production design and achieving cost control. In this study, a novel two-column cascade water distillation process coupled with a heat pump is developed to reduce energy consumption. To address the complex nonlinearity and multi-variable coupling characteristics of this process, an optimization and prediction model based on a back propagation(BP) artificial neural network was proposed. The model architecture was optimized with 7 hidden neurons and trained using 2085 sets of rigorous simulation data, in which the number of theoretical stages, compression ratio, and circulating working-fluid flow rate are selected as input variables, enabling accurate predictions of heavy water purity, energy-saving efficiency, and total cost. The results demonstrate the model's exceptional reliability. The predicted values for all output variables showed high consistency with the experimental data, with the correlation coefficients(R) exceeding 0.999 and the mean squared error(MSE) being minimized. Furthermore, a sensitivity analysis was conducted using Garson's and Yoon's algorithms to quantify the relative importance of input variables. The analysis reveals that the compression ratio is the dominant factor influencing energy-saving efficiency, whereas the reflux ratio(correlated with circulation flow) significantly impacts product purity and total cost. Based on these findings, an optimized operational strategy is proposed: a higher compression ratio should be prioritized to minimize energy consumption, while a higher reflux ratio is recommended to balance equipment investment and operational expenses. Overall, this study demonstrates that machine learning techniques can be used as powerful optimization tools for complex multivariable separation processes. The proposed framework reduces the reliance on extensive experimental trials, simplifies the exploration of operating conditions, and provides an efficient strategy for process design and optimization in deuterium water distillation systems.

Key words: machine learning; D₂O concentration; multi-tower cascade; optimal design

氘水(D₂O)作为一种重要的化学原料,广泛应用于核能领域,尤其是在核反应堆中常作为中子慢化剂。此外,氘水在医学^[1]、生物^[2]、有机合成^[3]等研究领域也有着广泛的应用。例如,在核反应堆中,氘水可以减少中子损失,增强核裂变反应的效率^[4],而在化学合成中,它作为反应介质能大大提高某些特定反应的选择性^[5]。因此,氘水的生产与纯化在满足工业需求、提高核能效率和环保要求方面具有重要意义^[6]。随着氘水需求的逐步增长,如何提高氘水提纯工艺的效率 and 降低其生产成本,成为当前亟待解决的技术难题。

在氘水浓缩过程中,精馏作为一种传统且成熟的分离技术,通常被用来进行氘水与水(H₂O)分离^[7-8]。精馏过程中,利用氘水和水的物理化学性质差异,通过温度和压力的调节,达到分离目标。然而,现有的精馏工艺在实际应用中存在一定的缺陷和局限性^[9]。首先,传统的单塔精馏通常需要较长的操作周期和较高的能量输入,导致

能耗和经济成本较高^[10]。其次,单塔精馏过程的分离效率受多种因素影响,特别是在多组分混合物的处理上,往往难以实现高效的分离^[11-12]。此外,现有精馏技术的操作调节通常依赖经验,缺乏高效的优化手段,这使得其在面对复杂的工艺参数时表现出一定的局限性。

热泵精馏技术作为氘水提纯过程中潜在的优化工艺,通过有效地回收和利用低温热能,能够显著降低能源消耗,并提高整体系统的热效率^[13-15]。然而,热泵过程涉及多个相互耦合的操作参数,使得其优化变得异常复杂。多参数优化的难度主要体现在如何平衡这些相互关联且非线性的操作变量,以达到最佳的分离效果。传统的优化方法往往难以精确控制这些参数的变化,而机器学习模型在这一过程中展现出了显著优势^[16-19]。通过构建基于大量实验数据的机器学习预测模型,能够自动识别和学习不同工艺参数对氘水提纯效果的影响,进而优化精馏过程中的关键控制

参数。与传统的经验性调节方法相比,机器学习模型能够提供更为精确的预测结果,从而避免了人为调节的误差和局限性,并能在复杂的操作条件下快速找到最优的工艺参数组合,显著提高分离效率并降低成本^[20-21]。

本工作拟通过建立多塔级联精馏过程的数学模型,首先模拟不同塔板数和操作条件下的分离效果。接着,采用机器学习算法,对精馏过程的关键参数进行优化,精确预测最优的操作条件和成本效益。通过对比仿真结果与实验数据,验证该优化方法在提升分离效率、减少能耗和降低成本方面的有效性和优势。本研究为氘水的高效提纯提供了一种新颖且经济的技术路线,并为类似的复杂分离过程提供了具有潜力的优化策略。

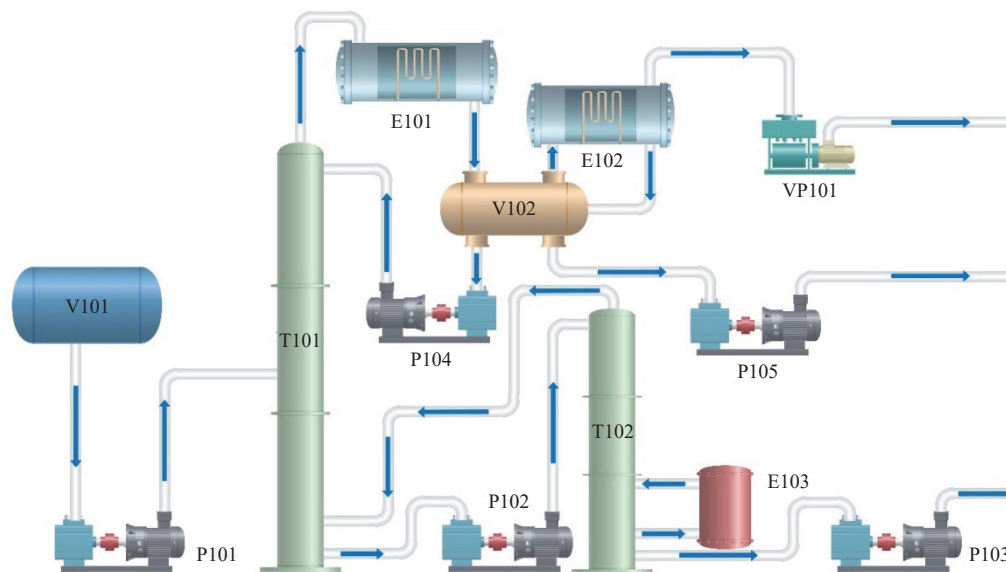
1 计算模型及参数

1.1 工艺流程

水精馏法是利用各组分间相对挥发度的差异来实现分离,是大规模分离氢同位素的有效手段^[22]。由于 D_2O-H_2O 蒸气压相差较小,所需分离级数较多,可采用级联运行方式获取高丰度的同位素产品。图1为二塔级联水精馏工艺流程图。如图1所示,该系统由三部分组成,分别为氘水进料系统、精馏系统和真空系统。氘水进料系统由

一个原料储罐(V101)和一个进料泵(P101)组成。精馏系统为装置的核心,由精馏塔(T101、T102)、冷凝器(E101)和再沸器(E103)组成。塔顶回流系统包括一个管壳式换热器、回流罐(V102)和回流计量泵(P104)。冷阱系统由两个并联的冷凝器(E102)组成,确保防止未冷凝的水蒸气到达真空泵(VP101)。对于精馏塔T101、T102级联过程^[23],精馏塔T101中,塔底液体通过液相管路在输送泵(P102)的作用下进入精馏塔(T102)塔顶,塔顶气相经过多级冷凝后,一部分回流至精馏塔,另一部分作为轻组分采出;在精馏塔T102中,塔顶气相送入精馏塔(T101)塔釜,塔釜液体一部分气化后返回塔内,另一部分作为富氘水产品采出。

对于 D_2O-H_2O 精馏过程,由于氘与氢的蒸气压相差甚小,通常需要较大的回流比才能满足分离要求,导致系统能耗较高。在本工艺中,进料量为24 kg/h,进料组成为20%(质量分数,下同) H_2O 和80% D_2O ,精馏塔塔顶压力为13.3 kPa,全塔压降为14 kPa,塔顶与塔釜的温差相对较小。塔顶蒸汽再压缩式热泵是一种通过蒸汽再压缩提升热能回收效率的热泵系统,在能源高效利用、废热回收等方面具有显著优势^[24-25]。为降低 D_2O/H_2O 精馏分离过程中的能耗提供理论基础,



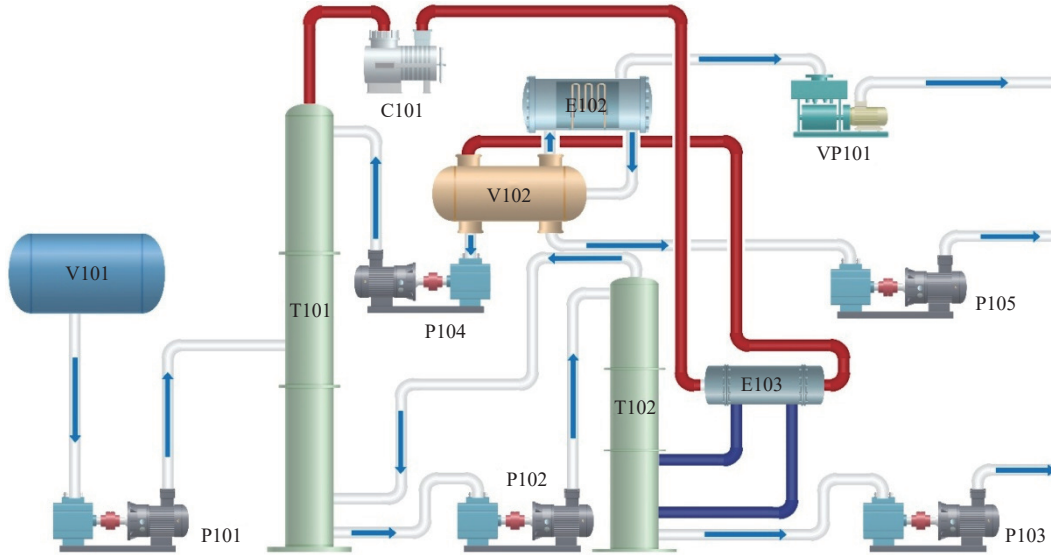
V101——原料储罐, V102——回流罐, E101、E102——冷凝器, VP101——真空泵, T101、T102——精馏塔, P101——进料泵, P102——输送泵, P103——塔釜采出泵, P104——回流计量泵, P105——塔顶采出泵, E103——再沸器。

图1 二塔级联水精馏工艺流程图

Fig. 1 Process flow diagram for water distillation of two-tower cascade

本研究构建了二塔级联水精馏耦合热泵工艺流程(图2)。如图2所示,以中间换热器E103作为媒介,塔顶蒸汽经压缩机C101压缩升温后作为热源,与塔釜的冷流股进行热交换。冷却的循环液体经节流阀减压后,一部分作为塔顶轻组分采

出,另一部分作为回流液返回塔内。塔釜物料部分采出,余下部分则通过换热器加热蒸发后返回塔釜。热泵精馏工艺利用冷热物流直接进行热交换,减少了对冷凝水和蒸汽的需求,提高了热力学效率。



V101——原料储罐, V102——回流罐, C101——压缩机, E102——冷凝器, VP101——真空泵, T101、T102——精馏塔, P101——进料泵, P102——输送泵, P103——塔釜采出泵, P104——回流量计泵, P105——塔顶采出泵, E103——中间换热器。

图2 二塔级联水精馏耦合热泵工艺流程图

Fig. 2 Process flow diagram of two-tower cascade water distillation coupled with heat pump

1.2 计算模型

假设同位素氢原子在氧原子之间随机分布,则可以认为同位素交换反应的产物和反应物为理想混合^[7,26]。



分离因子 α 可以定义为:

$$\alpha = \frac{n(\text{H}/\text{D})_{\text{gas}}}{n(\text{H}/\text{D})_{\text{liquid}}} \quad (2)$$

式中: $n(\text{H}/\text{D})$ 是气相(gas)或液相(liquid)中氢与氘的摩尔比。

由于分离因子 α 在固定温度下对混合物中任何比例的水同位素形式(H_2O 、 HDO 和 D_2O)几乎保持不变,并且水的同位素交换反应以足够快的速率进行,则 HDO 的平衡常数(K_{HDO})和饱和蒸气压(p_{HDO}^{\ominus})分别为^[27]:

$$K_{\text{HDO}} = \frac{c^2(\text{HDO})}{c(\text{H}_2\text{O})c(\text{D}_2\text{O})} = 4 \quad (3)$$

$$p_{\text{HDO}}^{\ominus} = \sqrt{p_{\text{H}_2\text{O}}^{\ominus} p_{\text{D}_2\text{O}}^{\ominus}} \quad (4)$$

因此分离因子 α 可以用 H_2O 和 D_2O 的饱和蒸气压之比来表示^[28]:

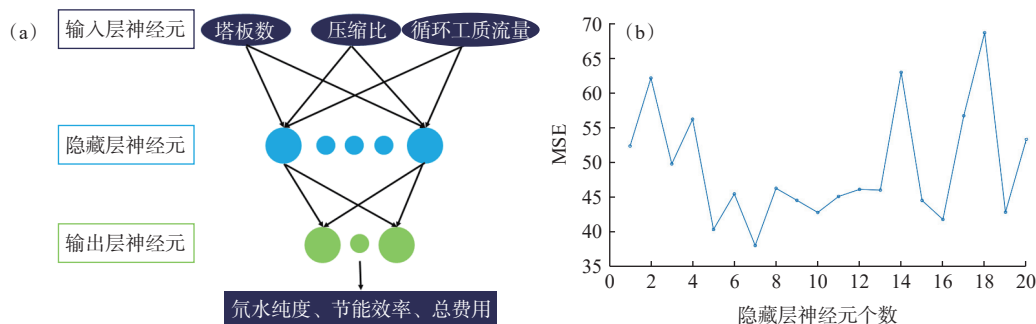
$$\alpha = \sqrt{\frac{p_{\text{H}_2\text{O}}^{\ominus}}{p_{\text{D}_2\text{O}}^{\ominus}}} \quad (5)$$

$$\ln \frac{p_{\text{H}_2\text{O}}^{\ominus}}{p_{\text{D}_2\text{O}}^{\ominus}} = \frac{26398.8}{T^2} - \frac{89.6065}{T} + 0.075802 \quad (6)$$

式中: $p_{\text{H}_2\text{O}}^{\ominus}$ 、 $p_{\text{D}_2\text{O}}^{\ominus}$ 分别为 H_2O 和 D_2O 的饱和蒸气压; T 为温度。

1.3 人工神经网络

在工程上,氘水量纯度、系统的节能效率和总费用(包括设备费用和操作费用)受塔板数、循环工质流量以及压缩比等各种参数的影响。由于这些参数的非线性特性,不能使用简单的数学模型来分析它们对于精馏过程的影响。因此,本研究使用人工神经网络(ANN)通过模拟数据训练模型并评估输入变量的相对重要性^[29]。ANN结构采用前反馈神经网络(FNN),包括一个输入层、一个或多个隐藏层和一个输出层^[30](图3(a))。如图3(a)所示,输入层包含三个神经元,代表影



MSE为均方误差。

图3 ANN神经网络模型(a)及不同隐藏层神经元数量的ANN预测模型性能(b)

Fig. 3 ANN neural network model(a); ANN prediction model performance(b) for different number of hidden neurons

响分离和节能效果的因素,如塔板数、循环工质流量和压缩比。输出变量为汽水纯度、节能效率以及总费用。根据本研究的模拟数据,确定了输入和输出值。隐藏层神经元个数对模型的预测性能有重大影响。隐藏层神经元数量过少会导致预测不准确,而过多会导致过度拟合。在该研究中,通过最小化均方误差(MSE),确定了7个隐藏层神经元的数量,并使用Tan-Sigmoid函数作为激活函数(图3(b))。模型的训练、验证和测试使用了2085组模拟数据,分别占70%、15%和15%,并使用Levenberg-Marquardt反向传播算法进行训练。结果表明经过训练的模型可以做出准确的预测,从而有助于研究输入和输出变量之间的关系。

2 结果与讨论

传统模型可以揭示过程中的动态行为,但在变量之间具有复杂非线性的系统中,它们有时会达不到要求,无法快速解决和预测。尤其对于满足分离要求的精馏工艺,必须进行优化计算,特别是复杂多变量体系,以实现整个流程能耗和费用最小化。对于塔顶蒸汽再压缩式热泵,回流比的大小由循环工质流量中的回流量决定。用塔板数衡量设备费用,回流比衡量操作费用,总费用可以表示为塔板数与回流比之积。与常规精馏相比,二塔级联水精馏耦合热泵工艺流程采用中间换热器代替了塔顶冷凝器和塔釜再沸器,通过转换压缩机的电力消耗减去了全部的蒸汽使用量和部分循环冷却水消耗量。根据石油化工计算能量标准^[31]将电力、冷却水、低压蒸汽等公用工程进行能量折算,结果列于表1。

则节能效率 η 可以计算为:

表1 公用工程能量折算值

Table 1 Utility energy conversion value

项目	能量折算值
电量	11.84 MJ/(kW·h)
循环冷却水	4.19 MJ/t
蒸汽	2 303 MJ/t

$$\eta = \left(1 - \frac{E_{\text{com, 蒸汽}} + E_{\text{com, 水}} - E_{\text{pump, 电}} - E_{\text{pump, 水}}}{E_{\text{com, 蒸汽}} + E_{\text{com, 水}}} \right) \times 100\% \quad (7)$$

式中: η 为节能效率; $E_{\text{com, 蒸汽}}$ 为普通精馏过程中低压蒸汽的能量折算值; $E_{\text{com, 水}}$ 为普通精馏过程中冷却水的能量折算值; $E_{\text{pump, 电}}$ 为热泵精馏过程中电力的能量折算值; $E_{\text{pump, 水}}$ 为热泵精馏过程中冷却水的能量折算值。

2.1 多参数优化预测

选择均方误差(MSE)和相关系数(R)两个评价指标来评估模型的预测性能,计算如下:

$$\text{MSE} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - y_i)^2 \quad (8)$$

$$R = \frac{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2}} \quad (9)$$

式中: N 是样本数; x_i 和 y_i 分别是第 i 个样本的预测值和实际值; \bar{x} 和 \bar{y} 分别是样本预测值和实际值的平均值。

图4(a、c、e)为样本的实际值和神经网络模型预测值的相对曲线,图4(b、d、f)为测试结果的误差图。由图4可知,预测值和实际值的曲线几乎重合,具有良好的拟合优度,证明机器学习对

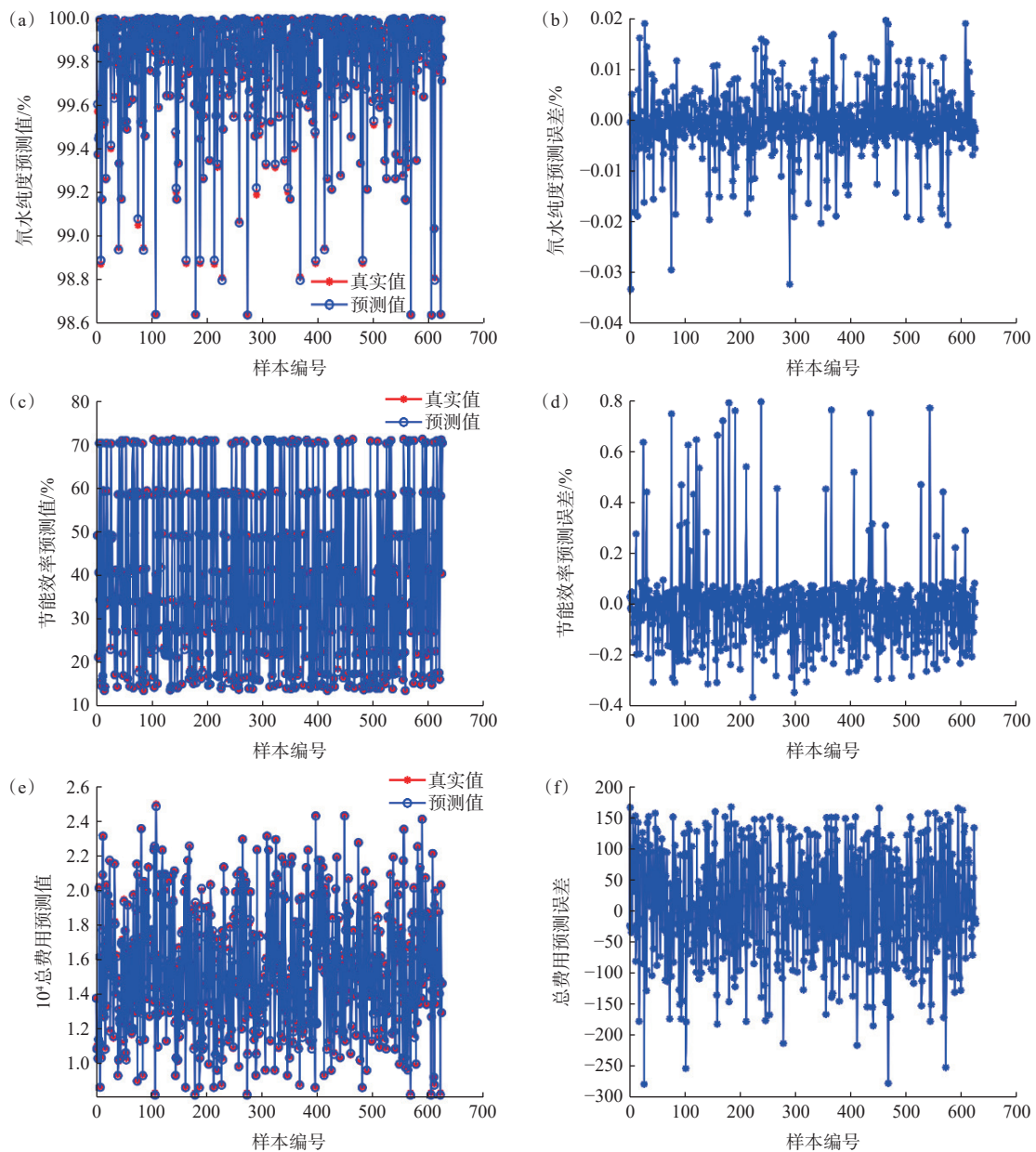


图4 氘水纯度的模型预测值与实际值相对曲线(a)及预测误差(b);节能效率的模型预测值与实际值相对曲线(c)及预测误差(d);总费用的模型预测值与实际值相对曲线(e)及预测误差(f)

Fig. 4 Relative curve(a) of model prediction and actual value and prediction error(b) of deuterium water purity; relative curve(c) of model prediction value and actual value and prediction error(d) of energy-saving efficiency; relative curve(e) of model prediction and actual value and prediction error(f) of total cost

于多参数优化预测具有较高的准确性。

图5散点图显示了模型预测值 Y 和实验值 T 之间的关系, 其中 Y 表示神经网络模型在给定输入条件下输出的预测结果, T 表示实验或过程计算得到的目标值。可以发现, 数据均分布在对角线 ($Y=T$) 上, 表明模型预测结果与实验值具有较高的一致性。使用相关系数 (R) 评估模型性能。对于输出变量氘水纯度、节能效率和总费

用, 训练集和测试集的相关系数 (R) 均在 0.999 以上。高 R 值反映了线性拟合的质量。MSE 是预测值和实际值之间的平均平方差, 是评估模型性能的重要指标。通过隐藏层神经元数量最小化 MSE, 模型表现出良好的预测性能, 为输入和输出变量之间的关系提供了有价值的见解。

本研究共 2085 项数据用于 ANN 模型的建立和评估。通过优化隐藏层中的神经元数量和学

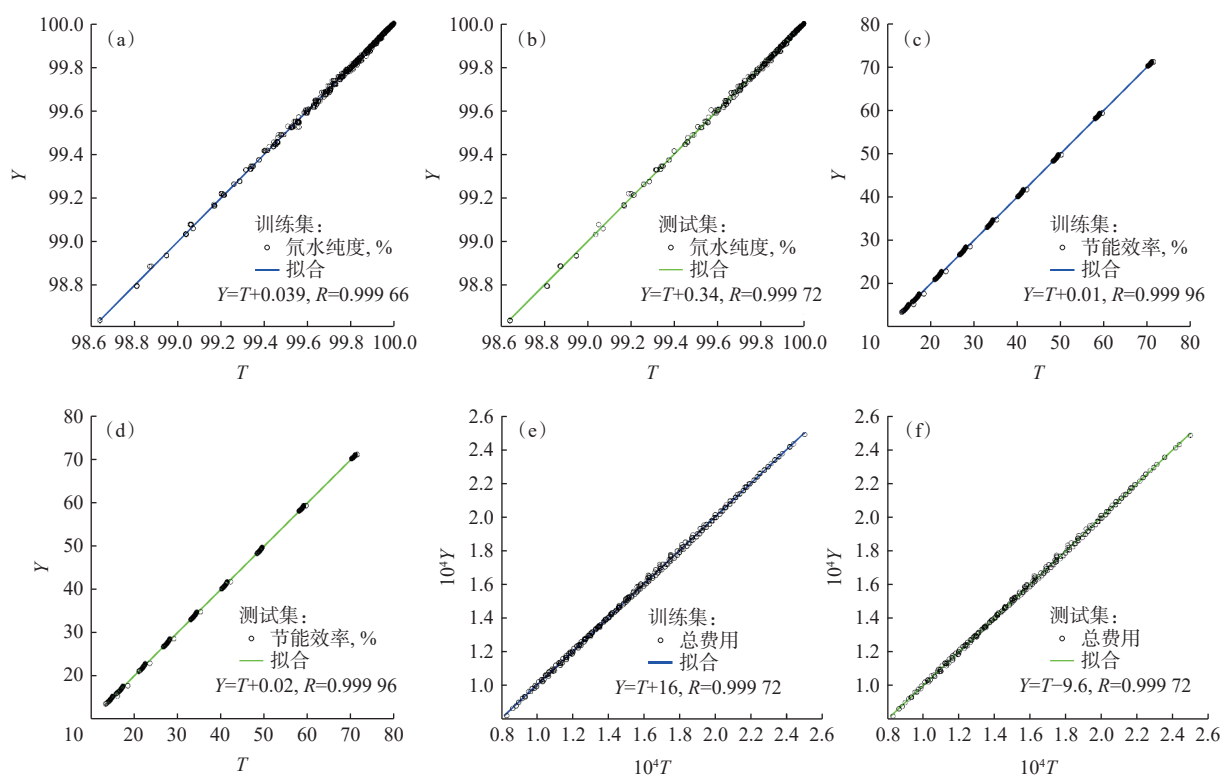


图5 氘水纯度训练集(a)和测试集(b)的预测值与实验值之间的关系;节能效率训练集(c)和测试集(d)的预测值与实验值之间的关系;总费用训练集(e)和测试集(f)的预测值与实验值之间的关系

Fig. 5 Relationship between predicted and experimental values of deuterium water purity of training set(a) and test set(b); relationship between predicted and experimental values of energy-saving efficiency of training set(c) and test set(d); relationship between predicted and experimental values of total cost of training set(e) and test set(f)

习率,使用三节点输入层、三节点输出层和七节点隐藏层来实现模型的建立。其中学习率为0.1,目标误差为 10^{-6} 。使用神经网络可以准确预测不同条件下氘水纯度、节能效率和总费用(图6)。如图6所示,目标点和输出点均匀分布在拟合曲线周围,ANN模型的训练、验证、测试和全局数据的相关系数(R)分别为0.99991、0.99991、0.99990和0.99991。证明该模型具有优异的训练效果和预测能力。表2、3给出了各级神经元的连接权重和各级网络结构偏置。ANN模型能够说明不同操作条件下各输出变量的不确定性和非线性关系,进一步表明ANN模型适用于预测多参数非线性关系,为工程上快速找到适宜操作条件提供了理论方法。

精馏过程涉及多变量耦合和非线性关系,本研究利用机器学习方法,获得了模型的权重和偏置,建立了二塔级联耦合热泵精馏中的非线性映射关系,实现了对氘水纯度、节能效率和总费用等关键性能指标的预测。因此,机器学习方法能够快速提供优化建议,减少实验成本和计算时

间,提高生产效率。

2.2 灵敏性分析

灵敏性分析用于确定输入因子对输出变量的影响程度。输入变量的相对重要性(RI)表示它们对输出变量贡献程度^[32]。在本研究中,Garson^[33]和Yoon等^[34]的方法用于评估输入变量的RI值,计算公式如式(10)和式(11)。两种计算方法均根据训练模型中神经元之间的连接权重计算RI值。其中Garson^[33]的方法通过计算连接权重的绝对值用于评估神经网络中变量的贡献,而Yoon等^[34]的方法可以确定输入和输出变量之间的关系方向。正值表示输出变量随着输入变量的增加而增加,而负值表示输出变量随着输入变量的增加而减少。

$$RI_{i,z, \text{Garson}} = \frac{\sum_{j=1}^G \frac{|w_{ij}| |w_{jk}|}{\sum_{i=1}^M |w_{ij}|}}{\sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^G \frac{|w_{ij}| |w_{jk}|}{\sum_{i=1}^M |w_{ij}|}} \quad (10)$$

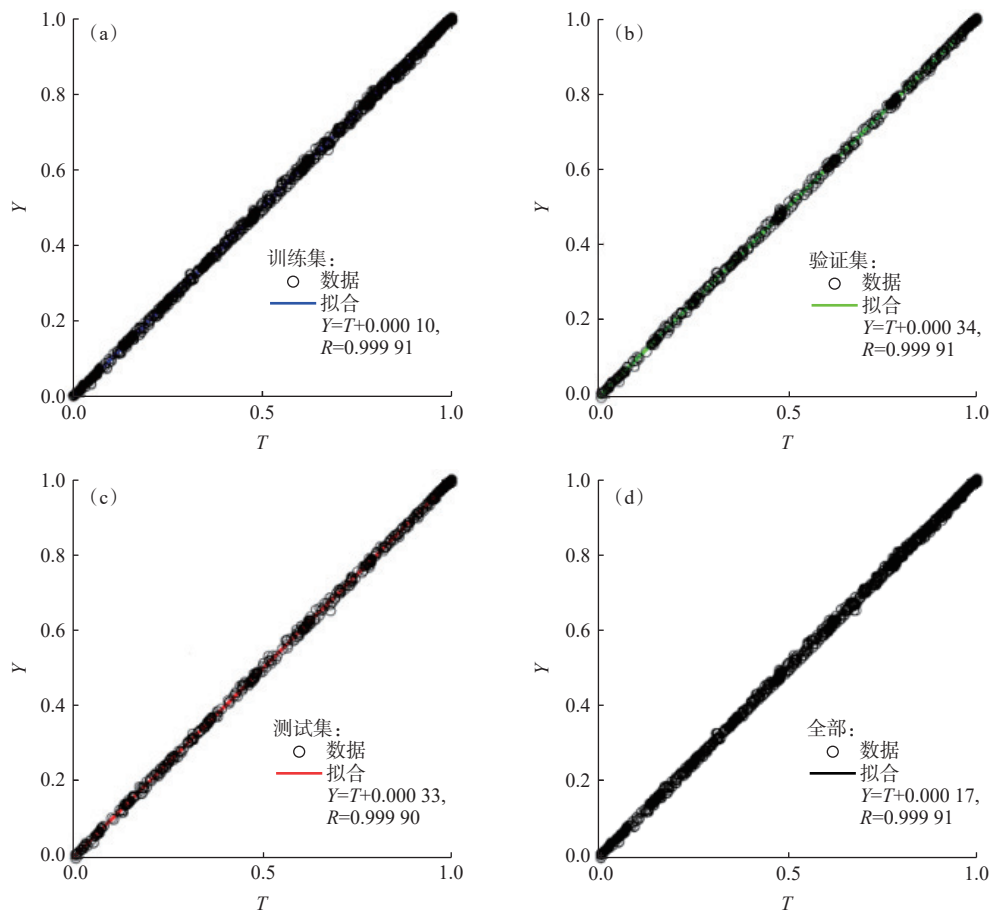


图6 训练集(a)、验证集(b)、测试集(c)和全部(d)输出变量的标准化实验值和预测值之间的关系
 Fig. 6 Relationship between standardized experimental value and predicted value of output variable of training set(a), validation set(b), test set(c), and all output variables(d)

表2 神经元的连接权重值(w)

Table 2 Connection weights(w) between neurons

神经元	隐藏层神经元1	隐藏层神经元2	隐藏层神经元3	隐藏层神经元4	隐藏层神经元5	隐藏层神经元6	隐藏层神经元7
输入层神经元1	-0.092 4	0.003 2	0.442 8	-0.396 6	1.410 6	0.013 2	-0.740 4
输入层神经元2	0.000 3	0.871 4	-0.003 7	0.000 9	-0.001 0	0.500 8	-0.001 8
输入层神经元3	-2.852 0	0.006 5	0.401 4	-0.383 9	-0.269 4	-0.016 3	-0.584 0
输出层神经元1	-0.685 0	0.010 3	-1.363 4	-5.494 5	0.283 7	-0.008 4	-0.042 3
输出层神经元2	0.000 3	-2.961 5	0.019 6	-0.020 9	-0.002 6	-1.185 8	-0.019 3
输出层神经元3	-0.083 9	-0.009 6	0.798 7	0.097 7	0.215 9	0.007 3	-0.714 5

$$RI_{iz,Yoon} = \frac{\sum_{j=1}^G w_{ij}w_{jz}}{\sum_{i=1}^M \left| \sum_{j=1}^G w_{ij}w_{jz} \right|} \quad (11)$$

式中: RI_{iz} 表示输入变量 i 的 RI 值; M 和 G 分别代表输入层和隐藏层的神经元数量; w_{ij} 表示输入层神经元 i 到隐藏层神经元 j 的权重; w_{jz} 表示隐藏层神经元 j 到输出层神经元 z 的权重。

图7 为不同输入变量对输出变量的相对重要

性(RI)结果。对于氙水纯度和总费用,可以观察到输入变量的RI值按以下顺序降低:塔板数>循环工质流量>压缩比(图7(a, c))。因此,在保证设备成本和运行成本降至最低的同时,应尽量选择回流比较大的条件进行氙水提纯。在这种情况下,总费用较低且分离效果较好。由图7(b)可以看出,压缩比是影响节能效率最大的因素。因此在保证分离效果的条件下,尽量提高压缩比以降

表3 各级网络结构偏置

Table 3 Network structure bias of all levels

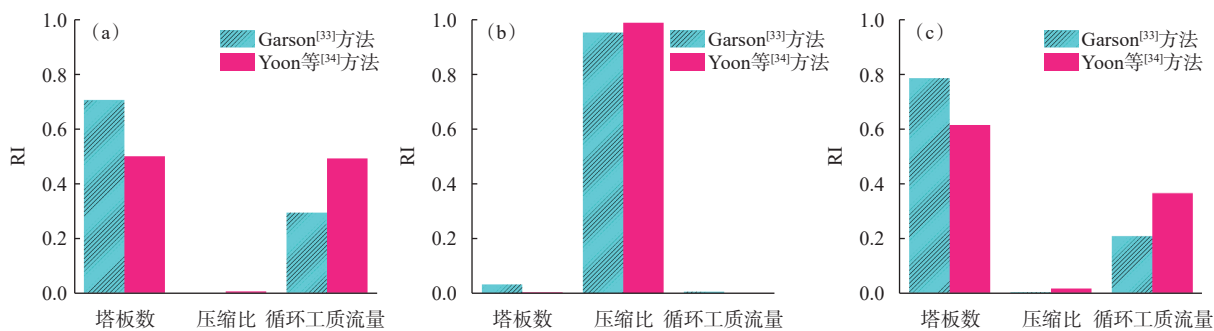
结构单元	偏置 B
隐藏层神经元1	-3.274 2
隐藏层神经元2	1.726 0
隐藏层神经元3	0.357 6
隐藏层神经元4	-1.202 6
隐藏层神经元5	1.720 2
隐藏层神经元6	-0.203 5
隐藏层神经元7	1.084 1
输出层神经元1	-4.139 6
输出层神经元2	2.300 6
输出层神经元3	-0.043 0

低系统的能耗。根据 Yoon 等^[34]方法的预测,发现塔板数、压缩比、循环工质流量均与输出变量

呈正相关。

3 结论

本研究针对氘水提纯工艺中存在回流比过大和能耗高等问题,建立了二塔级联水精馏与热泵耦合的优化工艺流程。面对优化过程中涉及多参数的非线性关系,传统优化方法难以精确调控操作变量。因此,本研究建立了BP神经网络模型,用于预测氘水纯度、节能效率及总费用。研究表明,机器学习方法在创建输入和输出参数之间非线性映射方面具有良好的适用性。灵敏性分析进一步表明,在保证分离效果的前提下,提高压缩比有助于降低系统的能耗。本工作建立了氘水高效提纯的优化模型,并为类似的复杂分离过程提供了具有潜力的优化策略。



(a)——氘水纯度, (b)——节能效率, (c)——总费用。

图7 不同输入变量对输出变量的相对重要性(RI)

Fig. 7 Relative importance(RI) of different input variables to output variable

参考文献:

- [1] 朱静,张晓懿,沈超,等.低氘水抗肿瘤机制及其应用研究进展[J].生物化工,2024(3):199-203.
- [2] Kseliková V, Vítová M, Bišová K. Deuterium and its impact on living organisms[J]. *Folia Microbiol*, 2019, 64(5): 673-681.
- [3] 廉菲,徐坤.采用重水为氘源的电化学氧化反应研究[J].*有机化学*,2020,40(10):3490-3491.
- [4] Cameron I R. The heavy-water-moderated reactor[M]// Nuclear fission reactors. Boston, MA: Springer US, 1982: 269-282.
- [5] Li W, Rabeah J, Bourriquen F, et al. Scalable and selective deuteration of (hetero)arenes[J]. *Nat Chem*, 2022, 14(3): 334-341.
- [6] 孙颖,王和义,桑革,等.反应堆含氘重水提氘关键技术研究进展[J].中国工程科学,2007,9(5):1-6.
- [7] Zhang Z, Zhang Z, Zhang X, et al. Effect of hydrophilic properties of packings on mass transfer performance of water distillation[J]. *Chem Eng Sci*, 2023, 269: 118486.
- [8] Trenin V D, Chernoby S N, Alekseev I A, et al. Full-scale experimental studies of the various type mass exchange packings by water distillation[J]. *Fusion Technol*, 1995, 28(3P2): 1579-1584.
- [9] 张姝雅,杨钱,金爱平,等.水精馏技术在氘化水分离中的应用进展[J].*核技术*,2023,46(6):060301.
- [10] 王君妍,陈超,李佳懋,等.三塔级联水精馏系统分离含氘轻水中试实验研究[J].*强激光与粒子束*,2024,36(1): 016001.
- [11] 夏修龙.H₂/HD 和 D₂/DT 低温精馏分离影响因素研究[J].中国核科技报告,2006(1):86-93.
- [12] 夏修龙.低温精馏氢同位素分离影响因素研究[J].*核技术*,2006,29(3):221-224.
- [13] Reddy C C S, Fang Y, Rangaiah G P. Improving energy efficiency of distillation using heat pump assisted

- columns[J]. *Asia Pac J Chem Eng*, 2014, 9(6): 905-928.
- [14] Gao X, Ma Z, Ma J, et al. Application of three-vapor recompression heat-pump concepts to a dimethylformamide-water distillation column for energy savings[J]. *Energy Technol*, 2014, 2(3): 250-256.
- [15] 主炳鑫,邹正宇,李世生,等.热泵精馏分离 D₂O/H₂O 工艺过程节能分析[J].*核化学与放射化学*,2025,47(5):540-547.
- [16] Kwon H, Oh K C, Choi Y, et al. Development and application of machine learning-based prediction model for distillation column[J]. *Int J Intell Syst*, 2021, 36(5): 1970-1997.
- [17] Monedero I, Biscarri F, León C, et al. Decision system based on neural networks to optimize the energy efficiency of a petrochemical plant[J]. *Expert Syst Appl*, 2012, 39(10): 9860-9867.
- [18] Li H, Wang W, Wang Y, et al. Dynamic real-time energy saving control of pressure-swing distillation based on artificial neural networks[J]. *Chem Eng Sci*, 2023, 282: 119271.
- [19] 吴栋,阮皓,胡石林,等.水-氢交换氘同位素体系 HD/H₂O、DT/D₂O 和 HT/H₂O 分离性能模拟研究[J].*核化学与放射化学*,2016,38(4):200-206.
- [20] Osulale F N, Zhang J. Energy efficiency optimisation for distillation column using artificial neural network models[J]. *Energy*, 2016, 106: 562-578.
- [21] Osulale F N, Zhang J. Energy efficient control and optimisation of distillation column using artificial neural network[J]. *Chem Eng Trans*, 2014, 39: 37-42.
- [22] 夏修龙,熊亮萍,任兴碧,等.低温精馏氘同位素分离工艺发展及其应用[C]//第二届全国核技术及应用研究学术研讨会大会论文摘要集.绵阳,2009:160-169.
- [23] 范晓彬,邹正宇,尚宪和,等.一种用于处理含氘或氘废水处理装置:CN202410359034.3[P].2024-05-10.
- [24] Combs R L, Googin J M, Smith H A. Vapor pressure studies involving solutions in light and heavy waters: II: the vapor pressure of heavy water and the separation factor of the mixed waters[J]. *J Phys Chem*, 1954, 58(11): 1000-1001.
- [25] 甄璞杰.基于自回热理论的精馏过程节能研究[D].南京:南京航空航天大学,2015.
- [26] Andreev B M, Magomedbekov E P, Raitman A A, et al. Hydrogen isotope separation by rectification[M]// Separation of isotopes of biogenic elements in two-phase systems. Amsterdam: Elsevier, 2007: 41-71.
- [27] Magomedbekov E P, Belkin D Y, Rastunova I L, et al. Simulation and optimization of the deprotonation cascade of a heavy-water moderator[J]. *Theor Found Chem Eng*, 2017, 51(2): 133-141.
- [28] Magomedbekov E P, Rastunova I L, Selivanenko I L, et al. Distribution of heavy hydrogen and oxygen isotopes in water distillation[J]. *Theor Found Chem Eng*, 2019, 53(2): 151-158.
- [29] Benardos P G, Vosniakos G C. Optimizing feedforward artificial neural network architecture[J]. *Eng Appl Artif Intell*, 2007, 20(3): 365-382.
- [30] Kim H, Zheng J, Babu P, et al. Key factors influencing the kinetics of tetra-*n*-butylammonium bromide hydrate formation as a cold storage and transport material[J]. *Chem Eng J*, 2022, 446: 136843.
- [31] 住房和城乡建设部,市场监督管理总局.GB/T 50441-2016 石油化工设计能耗计算标准[S].北京:中国计划出版社,2016.
- [32] Zhang Z, Wang F, Shen Q, et al. Integrating machine learning to uncover homogeneous catalytic mechanisms in *N*-vinyl-pyrrolidone synthesis[J]. *AIChEJ*, 2025, 71(4): e18724.
- [33] Garson G D. Interpreting neural-network connection weights[J]. *AI Expert*, 1991, 6(4): 46-51.
- [34] Yoon Y, Guimaraes T, Swales G. Integrating artificial neural networks with rule-based expert systems[J]. *Decis Support Syst*, 1994, 11(5): 497-507.