

烷基苯烷烃脱氢和烷基化装置流程模拟

朱家骏

(金陵石油化工设计院, 南京 214036)

摘要 应用 HYSIM 软件对烷基苯联合装置中的烷烃脱氢和烷基化装置进行了全流程模拟计算, 并与 UOP 原设计数据作比较, 为装置设计积累了数据, 对装置的技术改造和优化操作条件提供了全流程模拟平台。

关键词 流程模拟; HYSIM; 烷烃脱氢; 烷基化

分类号 TQ 649. 3

0 前言

金陵石油化工公司烷基苯厂的烷基苯联合装置是 70 年代从美国环球油品公司(UOP)和意大利欧洲技术公司(ET)引进的。笔者应用优秀的化工流程模拟软件 HYSIM 对烷基苯联合装置的烷烃脱氢和烷基化装置进行全流程模拟, 并与 UOP 原设计数据作全面的比较, 建立了合理可靠的流程模拟模型, 为装置设计积累了数据, 对装置的技术改造和操作条件的优化提供了全流程模拟平台。

1 流程简述

新鲜正构烷烃和由烷基化装置来的循环正构烷烃与循环氢压缩机(K-301)压出的循环氢气混合, 经换热器(E-301)加热, 再由进料加热炉(F-301)加热, 然后进入脱氢反应器(R-301)进行脱氢反应。出反应器的物流经换热器(E-301)冷却, 再经空冷器(E-302)冷却, 然后在低压分离器(V-303)中进行气液分离。气相物流为氢气, 一部分排出装置外, 另一部分去循环氢压缩机(K-301), 循环使用。液相物流进入提馏塔(C-301)分离出轻馏分, 塔底混合烷烃作为烷基化装置的原料。

脱氢装置来的烷烃烃混合物与干燥苯和循环苯合并后, 物流经空冷器(E-421)和冷却器(E-422)冷却, 再与循环氟化氢混合, 进入一级烷基化反应器(R-401), 烷烃和苯在氟化氢催化作用下发生烷基化反应。出一级反应器的物流进入一级分层器(V-401), 下层物流为氟化氢, 一部分去氟化氢再生塔(C-402)再生, 另一部分循环使用。上层物流为烃类, 进入二级烷基化反应器(R-402), 出二级反应器的物流进入二级分层器(V-40), 下层物流为氟化氢, 循环作用。上层物流为反应产物, 经氟化氢提馏塔(C-403)脱出氟化氢, 再经脱苯塔(C-404)

脱出未反应的苯。脱出的氯化氢和苯循环使用; 物流再进入脱烷烃塔(C-405), 蒸馏出的烷烃返回脱氢装置循环使用; 塔底物流由烷基苯再蒸塔(C-406)分离出重烷基化合物, 即得到合格的直链烷基苯产品。流程简图如图 1 和图 2 所示。

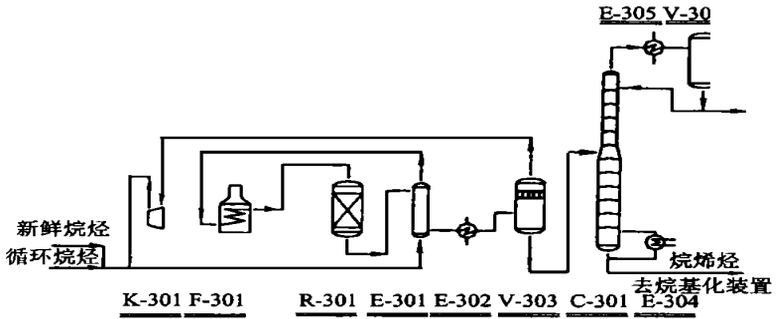


图 1 烷烃脱氢装置流程简图

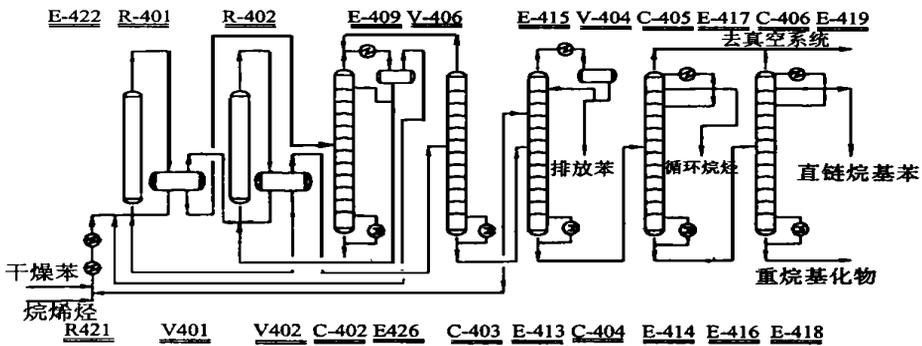


图 2 烷基化装置流程简图

2 流程模拟

根据原设计的工艺条件和物料组分用 HYSIM 软件进行全流程模拟, 采用 PRSV 方程作为全流程模拟计算的性质包。PRSV 方程具有处理非理想系统的优越能力, 其精确性可以达到活度模型的程度, 不仅很好地适用于烃系统, 而且对不相似组成构成的系统也能精确计算。对于烷烃脱氢和烷基化装置中既有复杂的烃类组成又有烷基化催化剂氯化氢这样的物系, PRSV 方程是非常适用的。

全流程模拟计算中, 物料组分除了纯组分用各自相应的组分外, 对于一些集团性组分(如异构烷烃, 芳烃, 环烷烃, 重烷基化合物等)根据其平均相对分子质量选择一个或两个纯组分来表示。由于 HYSIM 软件的组分库中没有相对分子质量等于异构烷基苯、重烷基化合物、茚满、萘满平均相对分子质量的代表组分, 模拟中只能选择相对分子质量最相近、物性最相似的纯组分来代表。全流程模拟中所选用的代表组分见表 1。具代表性的物流性质其 HYSIM 模拟计算值与 UOP 提供的原设计数据比较见表 2。从表 2 可以看出, 全流程模拟中采用的代表组分是可行的。

根据 UOP 提供的原数据计算得到反应器出口物流的各组分摩尔流量, 把烷烃脱氢反应和烷基化反应的反应器单元操作处理成一个符合原设计条件的化学计量反应器模块。

表 1 集团性组分其代表组分的选择

集团性组分		代表组分	
组分名	相对分子质量 ¹⁾	组分名	相对分子质量
环烷烃	173.0	1-CC ₆ -Octane Pent-CC ₆	196.4(50%) 154.3(50%) M = 175.4
异构烷烃	178.0	nC ₁₂	170.3
芳 烃	169.2	n-Hexyl-BZ	162.1
环烯烃	170.0	1-CC ₆ -Octane Pent-CC ₆	196.4(50%) 154.3(50%) M = 175.4
异构烯烃	167.9	1C ₁₂ =	168.3
二烯烃	166.0	1C ₁₂ =	168.3
异构烷基苯	247.1	n-HexdecylBZ	300.5
重烷基化物	352.0	n-HexdecylBZ	300.5
茚满+ 萘满	290.0	1C ₁₀ Naphthalene	268.4

1) 根据 UOP 提供的资料分析计算所得

表 2 物流平均相对分子质量及平均比重的比较

项 目	平均相对分子质量			平均比重		
	原设计值	模拟计算值	相对误差 / %	原设计值	模拟计算值	相对误差 / %
脱氢装置物流号						
1	165.7	165.77	+ 0.04	0.751	0.7506	- 0.05
2	164.4	164.46	+ 0.04	0.752	0.7512	- 0.11
6	164.3	164.25	- 0.03	0.753	0.7516	- 0.19
9	3.3	3.38	+ 2.37	-	-	
烷基化装置物流号						
4	78.2	78.13	- 0.09	0.879	0.8817	+ 0.13
5	164.4	164.58	+ 0.09	0.752	0.7513	- 0.09
6	242.2	243.71	+ 0.62	0.860	0.8578	- 0.26
20	20.9	20.86	- 0.19	0.972	0.9841	+ 1.23
24	117.0	117.10	+ 0.09	0.794	0.8293	+ 4.26
33	144.8	144.41	- 0.27	0.778	0.7924	+ 1.82
35	171.3	171.75	+ 0.26	0.764	0.7630	- 0.13
38	246.8	247.04	+ 0.10	0.860	0.8578	- 0.26

3 模拟结果和分析比较

用 HYSIM 软件对烷烃脱氢和烷基化装置化工工艺过程进行全流程模拟计算, 其计算结果与 UOP 原设计值比较, 见表 3.

表 3 HYSIM 模拟计算结果与原设计值比较

项 目		温度 /	压力 / MPa	相对分子质量	流量 / (kg/h)
烷烃脱氢装置					
进 E-301 管程物流	HYSIM 模拟计算值 相对误差 / %	111.85	0.40	20.55 - 0.24	63752 - 0.27
出 E-301 管程物流	HYSIM 模拟计算值 相对误差 / %	410.93	0.38	20.55 - 0.24	63752 - 0.27
进 R-301 物流	HYSIM 模拟计算值 相对误差 / %	499.00	0.34	20.55 + 0.05	63752 - 0.27
出 R-301 物流	HYSIM 模拟计算值 相对误差 / %	481.00	0.31	20.31 + 0.05	63732 - 0.30

续表 3 HYSIM 模拟计算结果与原设计值比较

项 目		温度/	压力/MPa	相对分子质量	流量/(kg/h)
烷烃脱氢装置					
出 E-301 壳程物流	HYSIM 模拟计算值 相对误差/ %	152.00	0.26	20.31 + 0.05	63732 - 0.30
出 V-303 气相物流	HYSIM 模拟计算值 相对误差/ %	49.00	0.247	3.38 + 2.42	9490 + 0.27
出 V-303 液相物流	HYSIM 模拟计算值 相对误差/ %	49.00	0.247	163.35 - 0.03	54242 - 0.40
C-301 塔顶	HYSIM 模拟计算值 相对误差/ %	49.00	0.21	37.33 + 7.27	65 - 5.80
C-301 塔底	HYSIM 模拟计算值 相对误差/ %	250.39	0.28	164.25 - 0.03	329.28 - 0.36
烷基化装置					
出 E-422 壳程物流	HYSIM 模拟计算值 相对误差/ %	38.00	1.19	139.32 + 0.01	64909 + 0.02
进 R-401 物流	HYSIM 模拟计算值 相对误差/ %	38.00	1.08	123.57 - 0.02	77527 - 0.02
出 V-401 下层物流	HYSIM 模拟计算值 相对误差/ %	38.00	0.42	20.86 - 0.19	9473 - 0.02
出 V-402 上层物流	HYSIM 模拟计算值 相对误差/ %	38.00	0.53	117.10 + 0.09	78679 + 0.05
出 C-402 塔底物流	HYSIM 模拟计算值 相对误差/ %	202.76	0.380	233.59 - 5.08	187 - 14.61
出 C-403 塔底物流	HYSIM 模拟计算值 相对误差/ %	184.51	0.370	144.41 - 0.27	66338 - 0.31
C-404 塔顶	HYSIM 模拟计算值 相对误差/ %	93.50	0.149	78.13 - 0.09	68 0
C-404 塔底	HYSIM 模拟计算值 相对误差/ %	232.30	0.175	171.75 + 0.26	55806 - 0.84
C-405 塔顶	HYSIM 模拟计算值 相对误差/ %	133.80	0.0095	164.58 + 0.11	48831 - 1.31
C-405 塔底	HYSIM 模拟计算值 相对误差/ %	267.53	0.028	247.04 + 0.10	6975 + 2.60
C-406 塔顶	HYSIM 模拟计算值 相对误差/ %	208.50	0.0035	243.71 + 0.62	6452 + 2.20
C-406 塔底	HYSIM 模拟计算值 相对误差/ %	288.05	0.0106	297.93 - 9.08	517 + 6.60

3.1 烷烃脱氢装置

在烷烃脱氢装置的全流程模拟计算中, 5 股关键物流(E-301 管程物流, E-301 壳程物流, R-301 进出口物流)的模拟计算值与原设计的最大相对误差仅为 0.30%, 关键单元操作(V-303, C-301)的工艺操作参数模拟计算值与原设计的操作参数吻合, 充分说明全流程物料平衡和能量平衡的模拟计算结果是准确可靠的。

在低压分离器(V-303)模拟计算中发现 UOP 原设计的低压分离器是一个简单气液两相分离器, 气相物流中夹杂的烃类超过设计值, 分离效果不令人满意。提馏塔(C-301)塔顶气相物流的平均相对分子质量和流量模拟计算值与原设计值的最大相对误差为 7.27%, 这也说明由于低压分离器(V-303)的分离效果欠佳, 塔进料中的轻烃类组分减少, 使塔顶气相

物流的平均相对分子质量偏高, 流量偏低。

3.2 烷基化装置

在烷基化装置的全流程模拟计算中, 4 股关键物流(E-422 出口物流, R-401 进口物流, V-401 下层物流, V-402 上层物流)的模拟计算值与原设计值的最大相对误差仅为 0.19%, 关键单元操作(C-402, C-403, C-404, C-405, C-406)的工艺操作参数模拟计算值与原设计的操作参数吻合, 充分说明全流程物料平衡和能量平衡的模拟计算结果是准确可靠的。

因为氟化氢再生塔(C-402)塔底物流的主要组分是重烷基化物, 此集团组分在模拟中是以 C_{16} 烷基苯代表的, 其相对分子质量比原设计中的重烷基化物相对分子质量小, 因而塔底物流的平均相对分子质量和流量模拟计算值偏低, 相对误差偏高。脱苯塔(C-404)脱苯后物料中含苯小于 0.3×10^{-6} , 符合原工艺要求。脱烷烃塔(C-405)脱烷烃后物料中含极微量的烷烃, 符合原工艺要求。烷基苯再蒸塔(C-406)塔顶物流为产品直链烷基苯, 塔底物流是以重烷基化物为主的副产品, 由于其集团组分的代表组分相对分子质量偏小, 同时由于再蒸塔分离效果好, 使大部分重烷基化物留在塔底物流中, 所以塔底物流的平均相对分子质量模拟计算值比原设计小, 塔底流量比原设计值大, 相对误差稍大。

4 结 论

1) 用 HYSIM 软件对烷基苯烷烃脱氢和烷基化装置进行的全流程模拟是成功的, 关键单元操作的工艺参数模拟计算值与 UOP 原设计的操作参数吻合, 物流模拟计算结果与 UOP 原设计值一致, 建立了合理可靠的流程模拟模型。

2) 为装置设计积累了数据, 对装置的技术改造和优化操作提供了全流程模拟平台。

Process Simulation of Pacol and Detergent Alkylation Unit of LAB Plant

Zhu Jiajun

(Jinling Petrochemical Design Institute, Nanjing 210042)

Abstract HYSIM software is used for process simulation of Pacol and Detergent alkylation unit of LAB plant. Compared with UOP's basic data it accumulates basic data for designing unit. And this simulation model can be applied to technical innovation and optimization of operating parameters.

Key words process simulation; HYSIM; pacol; detergent alkylation

(责任编辑: 陈 娇)