

芳烃抽提智能优化系统开发及应用

王雁君*, 高思亮, 张立博

(中国石油化工股份有限公司石油化工科学研究院, 北京 100083)

摘要:为实现芳烃抽提装置运行提供优化指导,基于云计算技术,集成流程模拟软件,建立芳烃抽提智能优化系统。将自主开发的芳烃抽提物料相平衡数据包与流程模拟软件相结合,为智能优化系统提供精确过程模型。模型计算结果与生产实际比较吻合,可在装置负荷率为设计值的60%~120%、原料芳烃质量分数为设计值的80%~110%范围内,预测出获得高纯度、高收率混合芳烃产品的主要操作参数,优化芳烃抽提装置的操作。

关键词:芳烃抽提;模型;模拟;智能;优化

中图分类号:TH3

文献标志码:A

文章编号:0253-4320(2021)06-0215-06

DOI:10.16606/j.cnki.issn 0253-4320.2021.06.044

Development and application of intelligent optimization system for aromatics extraction process

WANG Yan-jun*, GAO Si-liang, ZHANG Li-bo

(Sinopec Research Institute of Petroleum Processing, Beijing 100083, China)

Abstract: An intelligent optimization system is established for optimizing the aromatics extraction process, based on the cloud computing technology integrating with process simulation software applications. The self-developed phase-equilibrium data package for aromatics extraction process is combined with process simulation software to provide an accurate process model for the intelligent optimization simulation system. Calculation results by the model are consistent with actual production, and it can be used to predict and optimize the operating parameters for high purity and high yield of aromatic products with the plant load ranging from 60%–120% and the mass fraction of aromatics in the feed ranging from 80%–110%.

Key words: aromatics extraction; model; simulation; intelligent; optimization

芳烃抽提工艺是利用选择性溶剂对烃类各组分溶解性和选择性的不同,通过萃取、精馏等单元操作的组合来实现芳烃分离的过程。当前芳烃抽提的主要技术有液-液抽提和抽提蒸馏,其中抽提蒸馏工艺适用处理馏分较窄、芳烃含量较高的原料,流程简单、能耗低,为多数炼厂所采用。该工艺包括抽提蒸馏、溶剂回收和溶剂再生等单元。整个抽提蒸馏工艺关键在于溶剂选择,常用溶剂主要有环丁砜、甘醇类、*N*-甲酰基吗啉及复合溶剂等等。其中环丁砜溶剂应用最为广泛,如石油化工科学研究院(以下简称石科院)开发的以环丁砜为溶剂的抽提蒸馏工艺(SED)^[1-4]、美国GCT公司的GT-BTX抽提蒸馏工艺。

当前芳烃抽提工艺应用过程中,重在关注操作参数寻优,最大限度挖掘工艺潜能。多数研究利用通用流程模拟软件建立芳烃抽提装置模型,并结合企业实际数据,如各单元的进料温度、压力、流量等信息,获取相关二元作用参数,建立全流程模型。若模型在误差可控范围内,则对装置操作参数进行优

化^[5-9]。付博等^[6]通过Aspen软件建立SED抽提蒸馏-液液抽提组合工艺中抽提蒸馏装置模型,分析抽提蒸馏塔的溶剂比、溶剂温度、溶剂中苯含量、进料中苯含量以及进料温度对抽余油中苯含量和苯产品纯度的影响,得出最佳操作条件。

目前芳烃抽提蒸馏全流程模拟虽可为装置优化离线提供最优操作参数,但难以应对装置状况实时变化。为此,结合企业装置实时数据和自主研发的模型,石科院开发芳烃抽提智能优化系统,利用云平台部署通用流程模拟软件实时优化求解,传递最优操作参数,实现芳烃抽提过程的智能优化。

1 芳烃抽提工艺流程模拟

石科院开发了专用的芳烃抽提相平衡数据包,安装于通用流程模拟软件中,借助通用模拟软件的强大计算功能,进行工艺流程的研究与优化、工业装置优化设计、故障诊断及操作优化。

1.1 相平衡模型

芳烃抽提是一个典型的物理分离过程,涉及强

收稿日期:2020-12-08;修回日期:2021-04-06

基金项目:2017年国家工信部智能制造综合标准化与新模式应用项目——大型国产化芳烃智能工厂建设项目

作者简介:王雁君(1976-),女,硕士,高级工程师,研究方向为智能工厂、油品调合、生产计划与调度优化,通讯联系人, wangyj.ripp@sinopec.com。

极性的溶剂、水以及非极性或弱极性烃类的多元复杂体系,分离过程涉及多元体系的液液平衡和气液平衡。根据热力学定律,在一定温度 T 、压力 P 下处于平衡状态的两相,逸度相等。

对于气液平衡的两相 $f_i^V = f_i^L$, 即:

$$y_i \phi_i P = x_i \gamma_i P_i^0 \phi_i^0 \exp\left[\left(\frac{1}{RT}\right) \int_{P_i^0}^P V_i^L dP\right] \quad (1)$$

在低压下也可以简化为:

$$y_i P = x_i P_i^0 \gamma_i \quad (2)$$

液液两相达平衡时应满足:

$$x_i^I \gamma_i^I = x_i^{II} \gamma_i^{II} \quad (3)$$

式中 f_i^V, f_i^L 为组分 i 的气相和液相逸度; ϕ_i, ϕ_i^0 为组分 i 在系统状态及饱和状态下气相逸度系数; x_i, y_i 为组分 i 的液相及气相摩尔分率; γ_i 为液相组分 i 的活度系数; R 为气体常数; I、II 为平衡的 2 个液相。

γ_i 为组分 i 的活度系数,用于描述液相的非理想行为, γ_i 是计算强极性体系气液和液液相平衡的关键。常用的以局部浓度概念为基础的活度系数模型如 NRTL、UNIQUAC、UNIFAC 以及 LEMF 模型等均可用来关联极性体系的相平衡数据。以实验测定的溶剂-烃类、溶剂-水、烃-烃、烃-水之间不同二元体系的基础相平衡数据为基础,选定某一活度系数模型进行参数估值,对互溶二元系,采用气液相平衡数据(VLE),对于部分互溶系,则采用互溶度数据(LLE),必要时增加部分多元系的相平衡数据估计和校正模型参数值。

1.2 建立相平衡数据包及模拟系统

基础相平衡数据包括二元气液平衡、二元互溶度、多元气液和多元液液平衡数据。选取 20 多个具有代表性的烃(包括烷烃、环烷烃、芳烃)、5 种有机溶剂和水,测定各组分之间的基础相平衡数据。测定和关联二元基础相平衡数据,获得活度系数模型参数,再利用多元气液和多元液液平衡数据校验模型参数,建立芳烃抽提系统相平衡数据包。

以某厂环丁砜抽提蒸馏工艺为基础,工艺流程如图 1 所示,采用流程模拟软件对环丁砜芳烃抽提工艺进行了模拟及优化。抽提蒸馏塔、溶剂回收塔和非芳烃蒸馏塔均采用基于平衡级的 RadFrac 严格模型,结合所开发的相平衡数据和通用流程模拟软件,选择修正后的活度系数方程 NRTL 作为热力学方法,模拟计算芳烃抽提工艺过程。模拟计算产品收率和相应的装置操作条件,如抽提蒸馏塔、溶剂回收塔以及非芳蒸馏塔操作压力、塔顶塔底温度以及非芳蒸馏塔和溶剂回收塔的回流比等。

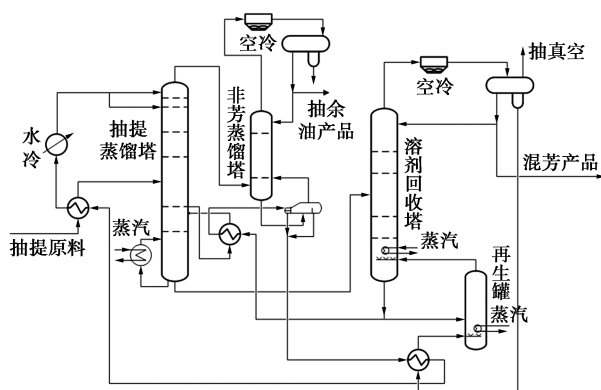


图 1 环丁砜抽提蒸馏工艺流程

2 云平台部署

将芳烃抽提工艺流程模拟模型集成应用到芳烃抽提智能优化系统中,并架构在计算机云端,借助其动态、灵活、弹性、共享和高效的计算资源来实现业务功能,提升系统的计算分析能力。用户采用 Web 页面方式访问,集成流程模拟软件应用,从企业 DCS/LIMS 自动采集模型所需的数据,通过自动/手动执行模型计算出产品收率及相应装置操作参数。系统总体结构设计如图 2 所示。

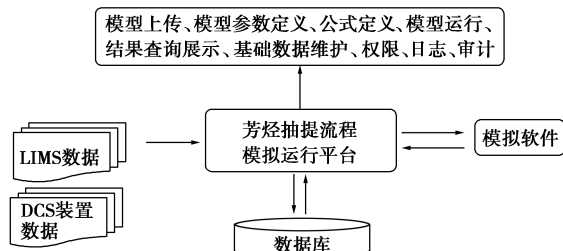


图 2 总体结构设计

3 模拟结果与讨论

石科院自主开发的相平衡数据包嵌入通用流程模拟软件,开发芳烃抽提智能优化系统,仅需采集用户装置的原料组成及流量,通过数据预处理得到合适的溶剂量以及主要塔系的采出量作为初值输入模型中,计算完成后能够得到生产合格产品所需的最优化操作参数,包括抽提蒸馏塔、非芳蒸馏塔、溶剂回收塔的温度、压力、回流比等,可作为企业操作人员优化生产的参考。模拟软件工作流程如图 3 所示。

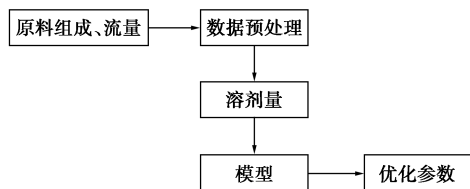


图 3 模拟软件工作流程

3.1 模型验证

以某企业芳烃抽提装置为研究对象,装置原料流量为 75 t/h,原料中芳烃质量分数为 49.5%,详细组成见表 1。原料流量和芳烃含量作为模型输入值,经预处理后,模型计算出当前工况下产品收率,如表 2 所示。

表 1 芳烃抽提装置原料

| 组分 | 苯 | 甲苯 | C ₈ 芳烃 | C ₆ 非芳烃 | C ₇ 非芳烃 | 合计 |
|--------|-------|-------|-------------------|--------------------|--------------------|-----|
| 质量分数/% | 12.68 | 35.20 | 1.64 | 37.86 | 12.62 | 100 |

表 2 产品组成及物性

| 项目 | 计算值 | | 实际值 | |
|---------------------------|--------|--------|-------|-------|
| | 混合芳烃 | 抽余油 | 混合芳烃 | 抽余油 |
| 质量分数/% | | | | |
| 苯 | 25.58 | 0.08 | 25.58 | 0.09 |
| 甲苯 | 71.09 | 0.14 | 71.08 | 0.19 |
| 二甲苯 | 3.25 | 0.06 | 3.24 | 0.08 |
| C ₆ 非芳烃 | 0 | 74.95 | | |
| C ₇ 非芳烃 | 0.08 | 24.90 | | |
| 质量流量/(t·h ⁻¹) | 37.02 | 37.90 | 37.00 | 37.92 |
| 密度/(g·mL ⁻¹) | 0.8514 | 0.7292 | | |
| 平均分子质量 | 87.6 | 87.2 | | |

定义苯、甲苯、二甲苯在混合芳烃产品中的质量分数之和为混合芳烃纯度,并根据原料及产品组成按照公式(4)计算芳烃的质量收率,计算结果见表 3。

表 3 混合芳烃纯度及收率 %

| 项目 | 计算值 | 实际值 |
|------------|-------|-------|
| 混合芳烃产品质量分数 | 99.92 | 99.90 |
| 混合芳烃质量收率 | 99.71 | 99.63 |
| 苯质量收率 | 99.70 | 99.64 |
| 甲苯质量收率 | 99.80 | 99.73 |

$$y = [x_b(x_f - x_r)] / [x_f(x_b - x_r)] \quad (4)$$

式中,y 为芳烃质量收率;x 为芳烃质量分数。下标为物流代号,f 为抽提原料;b 为混合芳烃;r 为抽余油。

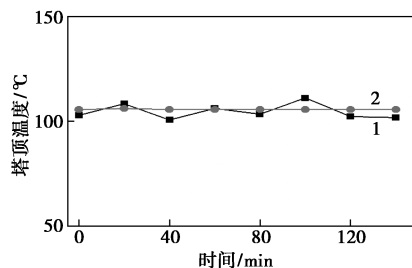
由表 3 可以看出,混合芳烃纯度、收率以及苯、甲苯收率实际值与计算值几乎相同。由此可见,基于嵌入自主开发的相平衡数据包的通用流程模拟软件所建立的芳烃抽提过程模型准确可靠。

芳烃抽提工艺中装置操作参数控制直接影响产

品收率。所建芳烃抽提过程模型基于模型输入值模拟计算产品收率的同时,可以得出相应的装置操作参数,为实际生产提供参考依据。基于所开发系统,将某一段时间内模型计算装置操作参数与系统实时读取的装置实际操作参数做比对,以验证所开发的芳烃抽提智能优化系统的准确性和实用性。

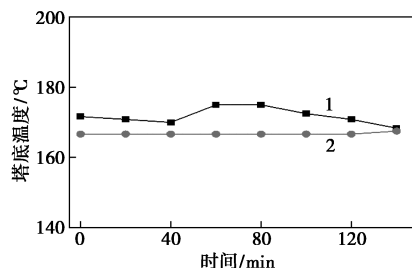
抽提塔塔顶、塔底的温度直接影响芳烃与非芳烃的分离效果。塔底温度过低,原料中的 C₇ 环烷烃很难被完全蒸发至塔顶,导致混合芳烃纯度不合格;温度过高则会导致芳烃(如苯)过多地蒸发至塔顶,降低芳烃的收率;塔顶温度影响类似。非芳蒸馏塔需要在一定压力和温度下才能够实现抽余油和溶剂的彻底分离;溶剂回收塔顶采出的物流即为混合芳烃产品,其流量为企业较为关心的产品数据。因此,对比分析抽提塔温度、非芳蒸馏塔压力和溶剂回收塔物料流量的模型计算值与装置实际运行值,以验证模型准确性。

由图 4(a)、(b)可以看出,抽提蒸馏塔实际控制塔顶和塔底温度略有波动。塔顶温度在模拟计算值(105.6℃)附近上下波动,与模拟值较为接近。塔底温度模拟计算值略低于装置实际值,但相差较小。由图 4(c)、(d)可以看出,非芳蒸馏塔塔顶、塔底压力模拟计算值分别在 160、180 kPa,非芳蒸馏塔实际值均在模拟计算值上下波动,整体而言计算值偏差基本上控制在 5% 范围内。图 4(e)、(f)为溶剂回收塔物流流量实际值与模拟计算值比对分析,可以看出塔顶物流流量计算值与实际值接近,而塔底



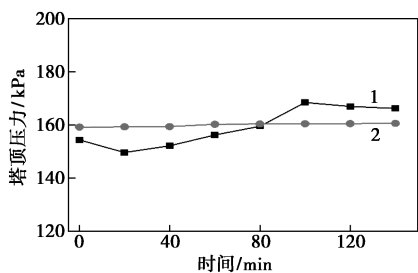
1—实际值;2—计算值

(a) 抽提蒸馏塔顶温度

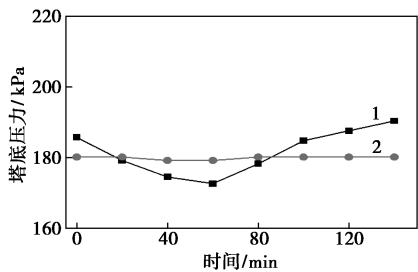


1—实际值;2—计算值

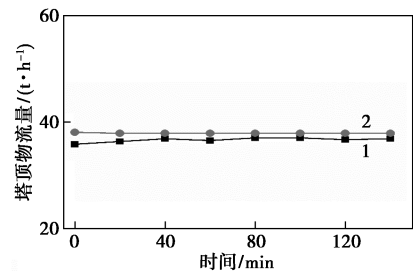
(b) 抽提蒸馏塔底温度



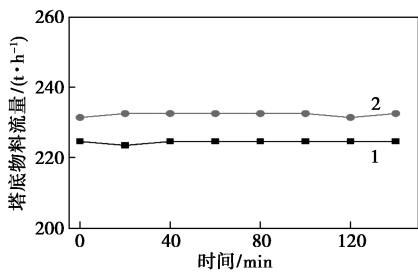
1—实际值;2—计算值
(c) 非芳蒸馏塔顶压力



1—实际值;2—计算值
(d) 非芳蒸馏塔底压力



1—实际值;2—模型值
(e) 溶剂回收塔顶物流量



1—实际值;2—计算值
(f) 溶剂回收塔底物流量

图 4 装置操作参数模拟值与实际值的对比

物料流量计算值略高于实际值,但整体相差不大。从装置操作参数模拟计算来看,模型可准确、实时地为装置实际操作提供参考。

3.2 原料流量变化对装置操作参数的影响

芳烃抽提工艺实际生产过程不可避免会出现原料流量、组成波动的情况。因此需要考察本模型是否能适应各类原料条件,并在保证混合芳烃产品纯度、收率达标的情况下,计算出处理不同原料所需要

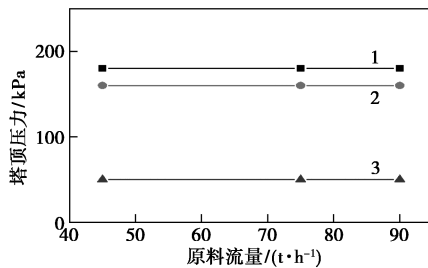
的操作条件,为装置实际操作提供参考和指导。

芳烃抽提工艺模拟过程不考虑装置负荷率的改变对精馏塔内水力学的影响,认为处理量变化时,塔板的分离效率保持不变。基于芳烃抽提智能优化系统,分别模拟计算在原料组成(见表 1)相同,原料流量为 45、75(设计值)、90 t/h 3 种工况,且满足产品纯度和收率前提下对应装置的操作条件。表 4 为芳烃抽提智能优化系统模拟计算的不同原料流量条件下混合芳烃的纯度与收率,可见原料流量在设计值的 60%~120% 范围内均可满足产品纯度、收率要求,对应的装置操作条件具有一定的参考性。

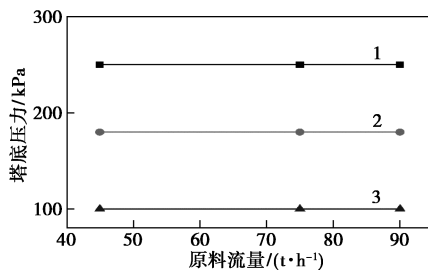
表 4 混合芳烃纯度及收率(计算值) %

| 原料流量/(t·h ⁻¹) | 45 | 75 | 90 |
|---------------------------|-------|-------|-------|
| 混合芳烃产品质量分数 | 99.93 | 99.92 | 99.93 |
| 混合芳烃质量收率 | 99.69 | 99.71 | 99.69 |
| 苯质量收率 | 99.60 | 99.70 | 99.60 |
| 甲苯质量收率 | 99.80 | 99.80 | 99.80 |

图 5 为智能优化系统模拟计算不同原料流量条件下抽提塔、非芳蒸馏塔和溶剂回收塔的温度、压力、物料流量、回流比等重要操作参数。由图 5(a)~(d)和(g)可以看出原料流量由 45 t/h 增加至 90 t/h,抽提塔、非芳蒸馏塔和溶剂回收塔的压力、温度、回流比并未发生变化。图 5(e)和(f)显示各塔内物料流量随原料流量增加而增加,原料流量增加,各塔的处理量增加,为正常操作现象。由此可见,如果原料组成不变,仅调整装置负荷率时,在保证产品纯度及收率的前提下,各物流的质量流量发生变化,但温度、压力等操作参数几乎无需调整。



(a) 塔顶压力



(b) 塔底压力

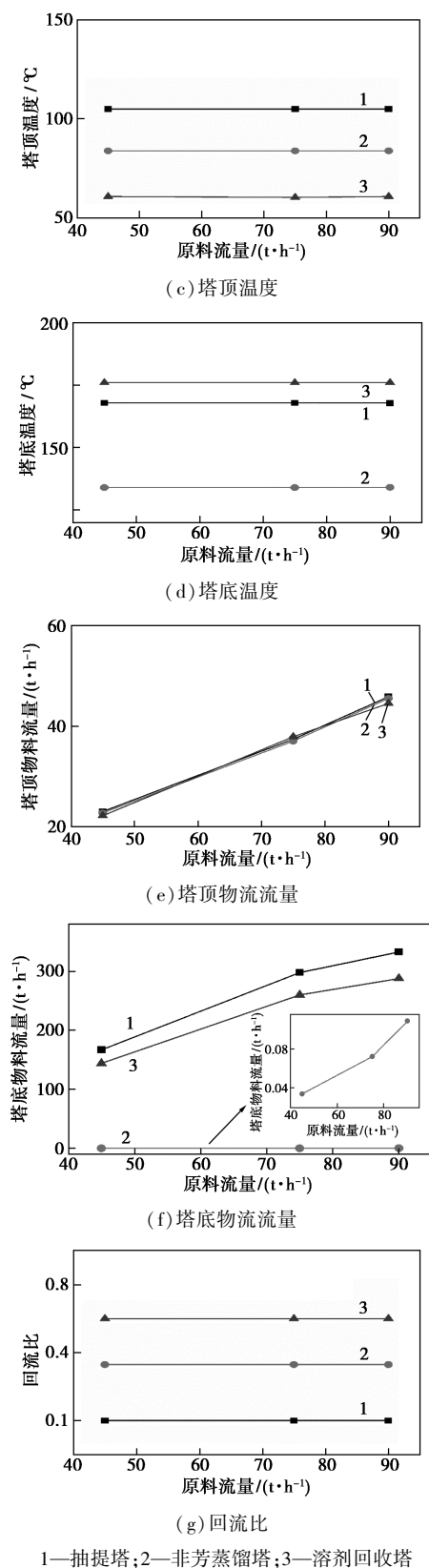


图5 原料流量变化对装置操作参数的影响

3.3 原料芳烃含量变化对装置操作参数的影响

芳烃抽提装置运行过程中原料芳烃含量波动对产品的纯度和收率有较大影响,因此需及时调整装

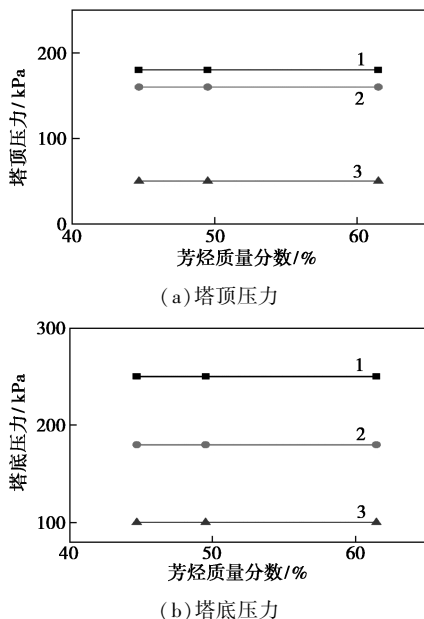
置操作条件应对原料芳烃含量变化。芳烃抽提智能优化系统可模拟计算在保证产品合格前提下,原料芳烃含量变化时抽提塔、非芳蒸馏塔和溶剂回收塔所设置的温度、压力、物料流量以及回流比等参数,为装置实际运行提供参考和指导。

芳烃抽提智能优化系统分别模拟原料流量恒定为 75 t/h,原料芳烃质量分数为 44.7%、49.5%、61.7%时,在合格的产品纯度和收率条件下,抽提塔、非芳蒸馏塔和溶剂回收塔的操作条件。表 5 为不同原料芳烃含量条件下,智能优化系统计算的产品纯度及收率。在装置设计值(原料芳烃质量分数为 55.88%)的 80%~110% 范围内,均可实现产品合格,其对应的装置运行条件具有参考意义。

表 5 混合芳烃纯度及收率(计算值) %

| 原料芳烃质量分数 | 44.7 | 49.5 | 61.7 |
|------------|-------|-------|-------|
| 混合芳烃产品质量分数 | 99.92 | 99.92 | 99.93 |
| 混合芳烃质量收率 | 99.67 | 99.71 | 99.70 |
| 苯质量收率 | 99.62 | 99.70 | 99.65 |
| 甲苯质量收率 | 99.73 | 99.80 | 99.75 |

图 6 为原料芳烃含量变化对装置操作参数的影响。由图 6(a)、(b)和(g)可以看出,原料芳烃含量增加对抽提塔、非芳蒸馏塔以及溶剂回收塔压力和回流比均无影响。图 6(c)~(f)显示原料芳烃含量降低后,在保证产品高纯度及收率的前提下,各物流的质量流量发生变化,抽提蒸馏塔底的操作温度明显升高,而其他温度基本不变。这是由于与环丁砜相比,芳烃的沸点较低,原料中芳烃含量下降意味着富溶剂中芳烃含量减少,富溶剂沸点升高,因此抽提



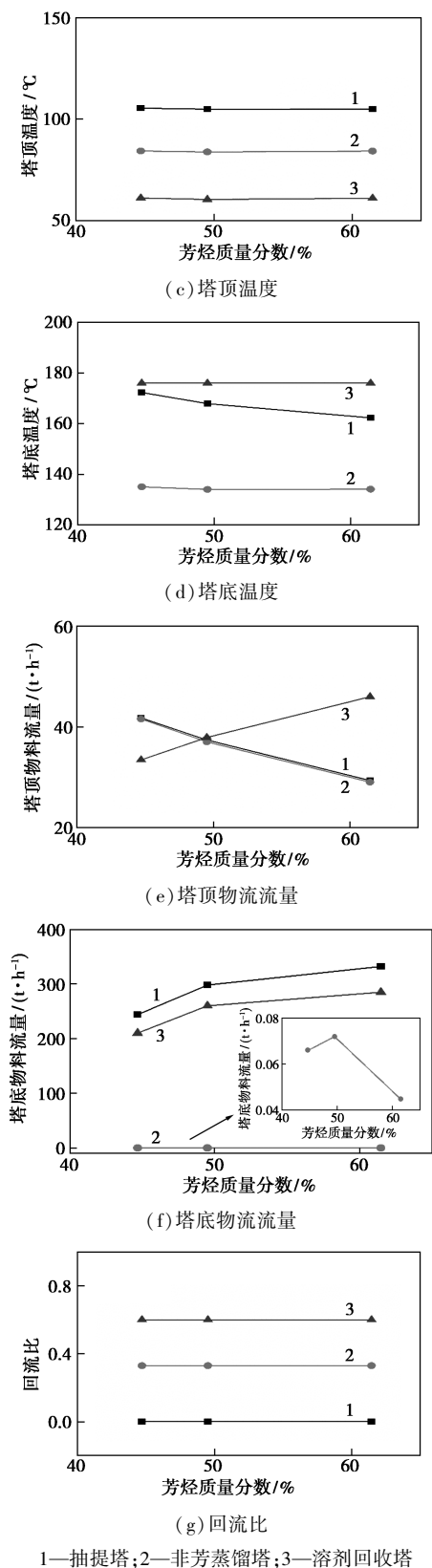


图 6 原料芳烃质量分数变化对装置操作参数的影响

蒸馏塔底操作温度升高。由于在设定原料组成时,苯和甲苯的质量分数几乎同比例降低, C₆ 非芳烃、

C₇ 非芳烃的质量分数同比例增大,最终得到的混合芳烃及抽余油组成基本不变,因此非芳蒸馏塔、溶剂回收塔的操作温度无明显变化。相反原料芳烃含量提高后,在保证产品高纯度及收率的前提下,各物流的质量流量发生变化,且抽提蒸馏塔底的操作温度明显降低,而其他操作温度基本不变。

事实上,当原料中总芳烃含量确定时,可以任意调整原料中各组分的质量分数,进而计算得到不同组成的混合芳烃和抽余油产品,这不会影响模型的运行与收敛。装置设计进料为 75 t/h,原料中芳烃质量分数为 55.88%,由图 5 和图 6 可见,原料进料流量为设计值的 60%~120%、原料芳烃质量分数为设计值的 80%~110% 范围内,通过本模型的计算,均能预测出获得高纯度、高收率混合芳烃产品的主要操作参数,可为实际操作的调整优化提供参考。

4 结论

结合某企业芳烃抽提装置,建立了符合实际生产过程的芳烃抽提智能优化模拟系统。该系统可实时准确预测芳烃抽提工艺产品收率及对应的抽提塔、非芳蒸馏塔和溶剂回收塔的温度、压力以及物料流量等参数。此外,模型可准确应对一定范围内的原料流量和芳烃组成波动,在装置负荷率为设计值的 60%~120%、原料芳烃质量分数为设计值的 80%~110% 范围内,均能预测出获得高纯度、高收率混合芳烃产品的主要操作参数,可为实际操作的调整优化提供参考。

参考文献

- [1] 陈寻成,唐文成.环丁砜抽提蒸馏工艺在海南炼化苯抽提装置的应用[J].石油炼制与化工,2007,38(10):12-15.
- [2] 田龙胜,何盛宝,唐文成,等.重整汽油抽提蒸馏分离苯新工艺的开发与工业应用[J].石油炼制与化工,2003,34(9):1-5.
- [3] 王净依,田龙胜,唐文成,等.环丁砜抽提蒸馏-液液抽提组合工艺的工业应用[J].石油炼制与化工,2002,33(6):19-22.
- [4] 田龙胜,唐文成,邬时津.抽提蒸馏分离纯苯及溶剂油的研究[J].石油炼制与化工,2001,32(7):5-8.
- [5] 祝录.Aspen Plus 软件在芳烃抽提装置的模拟应用[J].石油化工技术与经济,2015,31(6):27-30.
- [6] 付博,裴军,陈玉石,等.芳烃抽提蒸馏过程模拟和优化[J].化工进展,2013,32(S1):59-63.
- [7] 王乐,王建平.芳烃联合装置模拟与优化(I)——环丁砜芳烃抽提体系二元交互作用参数回归[J].中外能源,2013,18(10):75-79.
- [8] 王建平,王乐.芳烃联合装置模拟与优化(II)——芳烃抽提单元的全流程模拟与优化[J].中外能源,2013,18(10):76-80.
- [9] 苏佳林,董忠哲,郭鑫.环丁砜芳烃抽提过程的模拟与优化[J].石油石化绿色低碳,2019,4(4):26-31. ■