

# 苯加氢制环己烯反应器动态模拟及故障分析

曹 葵, 田文德\*, 宋晓云

(青岛科技大学化工学院, 山东 青岛 266042)

**摘要:**建立了苯加氢反应制环己烯的反应器模型,借助动态模拟与分析系统平台 DSAS 实现了该反应的动态模拟。在充分了解工艺流程的基础上绘制仿真工艺流程图,根据仿真流程图完成工艺平台所需的信息输入,利用 Visual C++ 编译出工艺模型并进行动态模拟。在程序中输入反应动力学并调试校正系数,使得模拟值与设计值一致,以验证模型的准确性。在建立的反应器动态模型上设立常见的进料量扰动、冷却水扰动及液位变化 3 个故障,通过动态模拟分析这些故障产生的后果。

**关键词:**反应器;动态模拟;故障分析

中图分类号:TQ032

文献标志码:A

文章编号:0253-4320(2015)02-0149-03

## Dynamic simulation and failure analysis of cyclohexene reactor in benzene hydrogenation system

CAO Wu, TIAN Wen-de\*, SONG Xiao-yun

(College of Chemical Engineering, Qingdao University of Science & Technology, Qingdao 266042, China)

**Abstract:** A cyclohexene reactor model for benzene hydrogenation reaction is established. With the help of DSAS, a platform for dynamic simulation and analysis system, the dynamic simulation of the reaction process is facilitated. The simulation process flow diagram is drawn, and then process information is input according to the simulation flow chart. A model of the process is compiled with Visual C++ to run the program. The reaction kinetics is input into the program and model coefficient is corrected in order to make the simulation value consistent with the design value. Some disturbances of the reactor, including feed disturbance, cooling water disturbance and the change in liquid level are set in the dynamic model. Their consequences can be analyzed through dynamic simulation.

**Key words:** reactor; dynamic simulation; failure analysis

化工生产由于具有易燃易爆、有毒有害、不稳定等特点,故不宜直接在生产装置上进行条件变化实验<sup>[1-2]</sup>。随着化工计算机模拟的普及和化工系统工程研究的不断深入,化工过程的动态模拟也逐渐趋于成熟。针对化工过程的上述特点,采用动态模拟的方法可以更深入地监测化工生产的动态参数,预测干扰出现时系统的各工艺参数如何随时间变化的问题,这对化工生产安全有着十分重要的作用。

苯加氢制环己烯反应的稳态模拟已比较成熟,动态模拟鲜有报道。由于苯与氢均为危险化学物,且反应过程中极易生成副产物环己烷,因此该反应有严格的温度、压力等参数控制指标。动态模拟<sup>[3]</sup>在研究流程相互作用、故障诊断、安全性及可靠性研究等方面有重要作用,建立苯加氢反应动态模型并模拟故障发生后反应器内各参数的动态响应对查找故障源有重要的作用。

## 1 反应器动态模型的建立

### 1.1 衡算基本方程

物料衡算方程<sup>[4]</sup>:

$$V_R (dc_A/dt) = V_0 c_{A0} - V_0 c_A - r_{Af} V_R \quad (1)$$

式中,  $c_A$  为反应器内 A 组分的浓度,  $\text{kmol}/\text{m}^3$ ;  $c_{A0}$  为进料中 A 组分的浓度,  $\text{kmol}/\text{m}^3$ ;  $r_{Af}$  为 A 组分的反应速率,  $\text{kmol}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$ ;  $V_0$  为进料的体积流量,  $\text{m}^3/\text{s}$ ;  $V_R$  为反应器体积,  $\text{m}^3$ 。

热量衡算方程:

$$V_R \rho c_{pT} (dT/dt) =$$

$$V_0 \rho c_{p0} T_0 - V_0 \rho c_{pT} T - V_R r_A \Delta H_R + KA(T_0 - T) \quad (2)$$

式中,  $c_{pT}$  为反应器内物料的摩尔定压热容,  $\text{J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$ ;  $c_{p0}$  为进料物料的摩尔定压热容,  $\text{J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$ ;  $T_0$  为进料温度,  $\text{K}$ 。

### 1.2 反应动力学方程

生成环己烷的反应动力学方程<sup>[5-7]</sup>:

收稿日期:2014-08-26;修回日期:2014-12-12

基金项目:山东省自然科学基金项目(ZR2013BL008)

作者简介:曹葵(1990-),女,硕士生;田文德(1973-),男,博士,副教授,从事化工系统工程方面工作,通讯联系人,0532-84022026, tianwd@qust.edu.cn。

$$(dc_{HA}/dt) = 1.57 \times 10^3 e^{-43.880/RT} p_H \quad (3)$$

式中,  $c_{HA}$  为反应器内环己烷浓度,  $\text{kmol}/\text{m}^3$ ;  $P_H$  为氢气分压,  $\text{kPa}$ 。

生成环己烯的反应动力学方程:

$$m = 1 + 3.7165 \exp(-6.6243 \times 10^4/(RT)) + 277.9106 \exp$$

$$(-2.3541 \times 10^4/(RT)) c_{A1} + 29.7544 \exp$$

$$(-0.8681 \times 10^4/(RT)) c_{A2} + 1.4587 \exp$$

$$(-3.0737 e^4/(RT)) c_{A3}$$

$$dc_{HE}/dt = \{120.62 \exp[(-2.7593 \times 10^4)/RT] - 301.69 \exp[(-2.0000 \times 10^4)/RT]\} / m^3 \quad (4)$$

式中,  $c_{A1}$  为进料中苯浓度,  $\text{kmol}/\text{m}^3$ ;  $c_{A2}$  为进料中环己烯浓度,  $\text{kmol}/\text{m}^3$ ;  $c_{A3}$  为进料中环己烷浓度,  $\text{kmol}/\text{m}^3$ ;  $c_{HE}$  为反应器内环己烯浓度,  $\text{kmol}/\text{m}^3$ 。

### 1.3 动态模拟

#### 1.3.1 动态模拟与分析系统简介

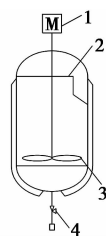
苯加氢制环己烯反应器的动态模拟过程借助动态模拟与分析系统(dynamic simulation & analysis system, DSAS) 作为工艺平台, 采用 Visual C++ 2005 作为编译环境, 采用了面向对象编程思路的 MFC(microsoft foundation class) 编程。DSAS 工艺平台遵循大型系统软件开发原则, 依据一定的规则, 将所要模拟的化工过程切分成为相互间没有或只有较少交互作用的各个独立部分, 主要包括组分、物流、设备、仪表、调节器、开关、手操器、阀等, 分别用相应的特定类予以描述。针对某一具体的工艺流程, 运用工艺平台, 开发人员只需通过一定的方式将流程的各个组成部件正确地搭接起来, 经过调试工作即可完成整个流程的动态模拟工作。

DSAS 已成功应用于 20 余套化工装置的动态仿真系统开发, 涉及合成氨、聚甲醛、醋酸、己内酰胺、氯乙烯、甲醇等工艺。

#### 1.3.2 动态模拟过程

苯加氢制环己烯反应器为搅拌釜式反应器, 其参数为: 直径 2.0 m, 高度 4.0 m, 溢流堰高 3.2 m, 温度 25℃, 压力 101.325 kPa, 夹套换热。反应要求控制反应器温度为 135℃, 压力 5 MPa, 苯转化率 40%, 环己烯选择率 79.5%。反应器如图 1 所示。

在充分了解工艺过程基础上, 绘制仿真流程图, 根据仿真流程图完成工艺平台所需的信息输入, 这包括过程矩阵填写; 阀、调节器、仪表、手操器、设备等的定义; 物流信息的定义; 为仪表和调节器显示值的赋值等。最后, 利用 Visual C++ 2005 编译出工艺模型运行程序。输入的数据部分由企业提供, 部



1—搅拌电机; 2—溢流板; 3—搅拌器; 4—卸料阀

图 1 苯加氢制环己烯反应器

分为计算结果, 另一部分是假设数据。其中, 企业提供的数据作为物流或控制点的设计值, 该值为设计单位提供的设计理论值, 也是模拟结果的目标值和参照值; 计算数据包括物性数据等, 为软件模拟计算结果; 假设数据作为调试的初始值, 仅起到初始化的作用, 其数值大小对程序的运行没有影响。各信息输入完毕后, 打开调试界面进行动态模拟。通过调节阀开度与积分微分值使得界面显示值即模拟值与设计值相等。再将液相苯加氢制环己烯的反应动力学方程输入到 VC++ 编写的程序里, 作为模拟时的基准方程, 进入反应状态下的动态模拟过程。在该方程的基准上不断调试修正系数及相关变量, 使得各仪表显示值尽可能接近设定值, 并且各物流中组分含量也与实际生产数据一致。此过程也是动态模拟逐步接近实际生产的过程。该过程相当于利用动态模拟对实际反应过程进行了再现, 是一个接近稳态的模拟过程。当各仪表显示数值与设计值一致且出口物流中组分含量达到要求, 说明此时的反应模型接近实际情况, 模型建立正确。

最终确定的生成环己烯和环己烷的反应动力学方程分别如下。

环己烷反应动力学方程:

$$dc_{HA}/dt = 3.847 \times 10^{-2} e^{-43.880/RT} p_H \quad (5)$$

环己烯反应动力学方程:

$$dc_{HE}/dt = 8.25 \times \{120.62 \exp[(-2.7593 \times 10^4)/RT] - 301.69 \exp[(-2.0000 \times 10^4)/RT]\} / m^3 \quad (6)$$

### 1.4 模拟结果

由表 1 和表 2 可以看出, 该动态模拟过程比较准确, 模拟值与设计值相差比较小, 说明建立的反应器动态模拟模型比较准确, 模型准确性得到验证。并且该模型可实时监测反应数据, 组分的温度、压力、流量、组成等均可实时监测, 在此模型基础上可以指导苯加氢反应器的操作。

表 2 中分别列出了原料氢气与苯的进料量及反应器正常反应时的温度、压力、液位控制指标。这些指标代表了反应器正常反应的基本控制指标。通过

模拟可以看出,模拟值与设计值完全一致,模型建立准确可靠。

表1 出料组分设计值与模拟值比较

出料主要组分	设计值/ ( $\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1}$ )	模拟值/ ( $\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1}$ )	误差/%
苯	266.163	273.83	2.88
环己烷	32.223	32.21	0.04
环己烯	143.029	151.74	6.09
氢气	0.06	0.058	3.33

表2 主要工艺参数模拟值与设计值

主要工艺参数	模拟值	设计值	误差/%
$\text{H}_2/(\text{m}^3\cdot\text{h}^{-1})$	3972.03	3972.03	0
$\text{C}_6\text{H}_6/(\text{kg}\cdot\text{h}^{-1})$	26923.42	26923.42	0
温度/ $^{\circ}\text{C}$	135	135	0
压力/kPa	5000	5000	0
液位%	80	80	0

## 2 故障模拟

在苯加氢制环己烯反应器中,影响反应效率的因素众多,除了保证反应的高效进行,反应过程的安全平稳进行也非常重要。在动态模拟中设置故障并模拟故障<sup>[8-10]</sup>状态对监测反应有一定的指导作用。本文中针对氢气进料、冷却水供应及液位发生改变而引起的故障进行模拟。

### 2.1 设置事故

事故包含进料扰动、冷却水换热扰动及液位变化3个故障。对反应器而言,持续稳定的进料状况,及时稳定的换热及液位的维持是反应器安全平稳运行的关键。实际生产中对这3个方面设置故障并监测相应参数的变化及提出合理的解决方案并不现实。因此借助动态模拟可实时监测反应状态的特点,在体系中人为地添加故障并记录数据,做出故障响应曲线,分析故障产生后参数变化趋势,对反应器的安全稳定运行有一定的指导作用。

### 2.2 故障模拟结果

#### 2.2.1 反应过程中中断氢气输送

由图2可知,反应过程中如果突然中断氢气输送,反应器内压力快速下降,模拟时间4 min内即可由5 000 kPa降至20 kPa,反应器内压力波动剧烈,对反应器和反应本身不利。说明氢气的及时连续供应是保证反应顺利进行的关键。

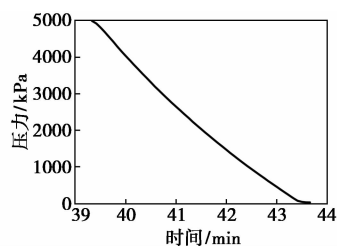


图2 反应器内压力随时间的变化

#### 2.2.2 反应过程中停止冷却水

由图3可以看出,当冷却水供应出现故障时,随着时间的推移温度快速上升,理论上反应温度应维持在 $135^{\circ}\text{C}$ ,但是冷却水不参与换热,温度在1 min内快速上升,无法保证反应器温度的稳定。

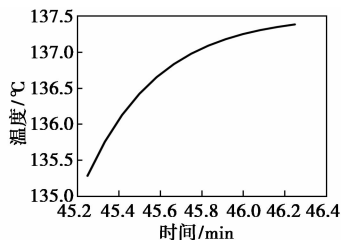


图3 反应器内温度随时间的变化

#### 2.2.3 反应器内液位高出正常值

由图4可知,反应过程中如果液位过高,体系压力先减小后上升最后逐渐趋于稳定,这将对反应速率有一定的影响。反应压力短时间内造成比较大的波动,对反应的稳定有较大的影响。而且液位过高,出口物流增大,单从该反应器来分析危险性不大,但是如果针对一个苯加氢流程,出口物流进入下一个油气分离设备后将对设备稳定性造成很大影响,因此反应器内液位不宜过高。

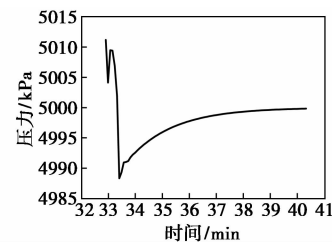


图4 反应器内压力随时间的变化

## 3 结论

提出了苯加氢制环己烯反应器动态模拟模型,并对特定故障进行了模拟,得到结论如下。

(1)反应器动态模型的建立可以真实有效地模拟接近稳态的实际情况,与实际生产数据误差较小。

(下转第153页)

到目前为止,缺乏对改良西门子法尾气回收料精馏工艺的脱轻-脱重和脱重-脱轻2种工艺路线的系统性研究,也没有这2种工艺路线的能耗比较。显然,对该物料精馏工艺的路线选择是极为不利的,直接影响到了改良西门子法精馏环节的节能降耗。

为了降低改良西门子法精馏过程的能耗,本文中针对尾气回收料精馏工艺,分别模拟和优化了脱轻-脱重和脱重-脱轻2种精馏工艺路线,分析和比较了2种工艺路线的综合热负荷;在此基础上,找出尾气回收料精馏所适合的工艺路线。

## 1 2种精馏工艺模型

脱轻-脱重工艺的模块图如图1所示。一级塔脱除沸点比 $\text{SiHCl}_3$ 低的组分,富集到塔顶馏出,塔底物料进入二级塔。在二级塔,沸点比 $\text{SiHCl}_3$ 高的组分富集到二级塔塔底,塔顶得到高纯三氯氢硅产品。

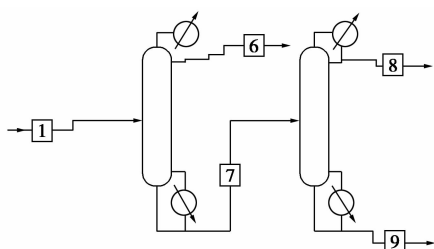


图1 脱轻-脱重工艺模块图

脱重-脱轻工艺的模块图如图2所示,一级塔脱除沸点比 $\text{SiHCl}_3$ 高的组分,富集到塔釜,塔顶物料进入二级塔。沸点比 $\text{SiHCl}_3$ 低的组分由二级塔塔

顶馏出,塔釜得到高纯三氯氢硅产品。

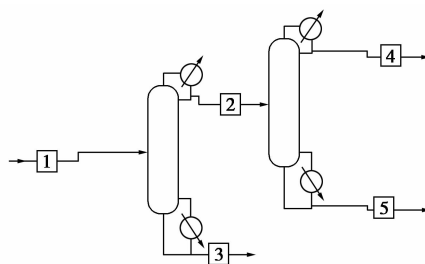


图2 脱重-脱轻工艺模块图

## 2 模型计算过程

对三氯氢硅精馏、四氯化硅氢化物精馏和尾气回收料精馏中的脱轻-脱重和脱重-脱轻2种工艺路线的每一个精馏塔模型,先用 Winn-Underwood-Gilliland 简捷法进行估算。根据进料组成、操作压力和分离要求,计算出最小回流比、最小塔板数,以及给定回流比下的塔板数和进料板位置。之后,将估算得到的塔板数和回流比代入严格法模型,同时联立求解物料平衡、能量平衡和相平衡关系,用逐板计算法求解给定精馏塔的分离结果。在分离要求得到满足的前提下,对进料板位置、回流比和塔顶(塔底)采出率进行优化,得到热负荷更低,采出量更高的操作方案。

在脱轻-脱重和脱重-脱轻2种工艺的一级塔进料组成方面,对三氯氢硅合成料精馏、四氯化硅氢化物精馏和尾气回收料精馏等情形,均给出了3种不同组成的进料,对应于进料在较大范围变化时的典型情况。这样做的目的在于,既能考察单一工艺进料组成中三氯氢硅质量分数从小到大变化时各个精

(上接第151页)

(2)通过校验苯加氢制环己烯反应的主副反应动力学方程系数,得出了比较接近真实情况的动力学方程。在 DSAS 系统中运行良好,参数指标比较稳定准确。

(3)针对反应器设立3个故障,并模拟了故障发生时反应器的动态响应。结果表明,该模型对故障响应合理,对数据的分析和预测有一定的作用。

## 参考文献

- [1] 马继勇,王健红,李慎彬,等.液相苯加氢工艺的动态仿真[J].计算机仿真,2006,26(4):97-100.
- [2] 贾国栋.苯加氢生产过程危险性分析及自控安全措施[J].科技视界,2013,(33):76-77.

- [3] 王树杰.精馏塔动态模型建立及故障模拟[D].青岛:青岛科技大学,2008.
- [4] 田文德,张军.化工安全分析中的过程故障诊断[M].北京:冶金工业出版社,2008.
- [5] 宋颖.钨基催化剂上苯选择加氢过程及动力学研究[D].天津:河北工业大学,2009.
- [6] 周志明,程振民,李卓,等.在 $\text{Pd}/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ 催化剂上液相苯加氢的反应动力学[J].华东理工大学学报,2004,30(1):1-5.
- [7] 李绍芬.反应工程[M].北京:化学工业出版社,2011.
- [8] 田文德,于子平,孙素莉.基于动态模拟的精馏塔故障诊断[J].计算机与应用化学,2011,28(12):1569-1572.
- [9] Yu D. Fault diagnosis for a hydraulic drive system using a parameter-estimation methods[J]. Control Engineering Practice, 1997, 5(9):1283-1291.
- [10] Berton A, Hodouin D. Linear and bilinear fault detection and diagnosis based on mass and energy balance equations[J]. Control Engineering Practice, 2003, 11:103-113. ■