

基于分子矩阵的炼油过程全厂模拟与优化

周齐宏¹ 胡山鹰¹ 陈定江¹ 尉志武²

(1.清华大学化学工程系,北京 100084; 2.清华大学化学系,北京 100084)

摘要:利用物流分子矩阵对多个生产单元过程进行建模,将单元过程的分子矩阵模型和全厂模拟优化相结合,采用分解优化策略对原料、产品和操作参数等进行优化。分子矩阵为模拟优化提供了更详尽的信息,尤其加强了对环境影响和产品质量的考虑。结果表明分子信息有助于掌握物质在炼油过程中的变化情况,基于分子矩阵模型的优化可以在满足产品质量和环境要求的条件下最大程度地提高企业的效益。

关键词:分子矩阵;过程模拟;优化;炼油过程

中图分类号:TE62;TP39

文献标识码:A

文章编号:0253-4320(2004)S2-0053-04

Modeling and optimization based on molecular matrix for overall refinery operation

ZHOU Qi-hong¹, HU Shan-ying¹, CHEN Ding-jiang¹, YU Zhi-wu²

(1. Department of Chemical Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China;

2. Department of Chemistry, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

Abstract: Mathematic models for several refining processes were built based on the molecular matrices. These models are integrated into the overall plant modeling and optimization. The feed-stocks, products and operating conditions are optimized with the decomposition optimization strategy. The molecular matrix can provide more information for the modeling and optimization, especially both influence on the environment and product quality are emphasized. The result shows that the molecular information can help to make a deeper understanding and new insights into refining operation. Optimization based on molecular matrices can greatly improve total profit on the constraint of product quality and environment requirements.

Key words: molecular matrix; process modeling; optimization; refining process

由于激烈的市场竞争,炼油企业要针对原料油的不同组成、顾客的不同需求、以及日益严格的环保法规等多种因素,调整企业自身的产品产量和产品结构,寻求有效降低成本的方法,实现以更小的生产成本获得更大的经济效益的目的。

在以前的工作中,我们提出用于馏分物性与分子组成的转换方法^[1],并对石脑油催化重整过程进行了研究,建立了催化重整过程的分子矩阵模型并进行了单个生产过程的优化计算。笔者在此基础上对其他生产单元过程(包括加氢脱硫、汽油稳定塔和油品调和)建立了分子矩阵模型,再将分子矩阵模型与全厂生产过程有机地结合并进行优化计算。通过分子矩阵模型的建立,对全厂生产过程模型进行优化,找到最佳的生产操作参数,使得企业获得市场竞争能力。

1 炼油过程的全厂生产模型

炼油企业在从炼制原油到调和生产出汽油的过程中包括许多工序,汽油产品是由多种前期工序产

品调和生产出来的。我们可以针对每一个生产单元建立分子矩阵模型,然后得到全厂生产过程的分子矩阵模型并进行优化计算。目前只对催化重整^[2]、加氢脱硫、汽油稳定塔和油品调和 4 个生产单元进行了分子建模工作,因而我们采用非分子矩阵模型代替未完成的分子矩阵模型部分进行全厂建模。

1.1 催化重整模型

催化重整是最常见的石油精炼单元过程,它可以大大提高油品的质量,我们以在 3 个固定床反应器中发生的催化重整反应为对象建立模型,原料经过该过程后芳烃含量大大增加而烷烃、环烷烃减少,产品研究法辛烷值(RON)增加,通过模型计算和实际生产数据比较发现模型预测值较为准确。

1.2 石脑油加氢模型

为防止催化剂中毒,需要进行加氢预处理。石脑油加氢模型选择一平推流反应器。反应器沿轴向方向可以被看作数个反应单元,每个单元可以当作一个全混釜。加氢过程涉及复杂的反应动力学问题,通过反应网络和反应路径的分析,建立相应的反

应动力学方程。通过加氢过程反应动力学模型的建立来从原料的分子矩阵获得产品的分子矩阵。

1.3 汽油稳定塔模型

在催化重整后产品进入汽油稳定塔分离成稳定汽油和轻组分,主要设备包括分离闪蒸器和重整油稳定塔,重整产品进入分离闪蒸器进行气液闪蒸,分离回收氢气,液体进入重整油稳定塔进行精馏,顶端得到轻组分烃类化合物,底端得到重组分稳定汽油。汽油稳定是一个精馏过程,和催化重整、加氢脱硫等反应过程的化学集总模型不同,精馏模型的集总是在虚拟组分基础上的,通过简捷法利用经验关联式和平均相对挥发度进行精馏模型计算。

1.4 汽油调和模型

在汽油调和过程中,19种汽油原料调和生产出4种汽油产品(90#、93#、95#和97#)。在原料中有一个是重整稳定汽油,其分子信息可从相应的分子矩阵模型计算得到;其他的原料分别来自常压精馏、加氢裂解、延迟焦化等过程,我们还未对这些过程建立分子矩阵模型,但可以通过传统模型计算出这些物流的性质,再通过物流性质转换分子信息的方法^[1]获得这18种原料的分子组成信息。在得到所有原料的分子信息后,给定从原料*i*到产品*j*的调和系数 b_{ij} ,通过调和关系式(1)得到产品的分子组成。

$$C_{P_j} = \sum_i (b_{ij} \cdot C_{F_i})$$

$$\sum_i b_{ij} = 1 \quad (1)$$

C_{P_j} 是调和和产品*j*的分子组成矩阵; C_{F_i} 是调和原料*i*的分子组成矩阵; b_{ij} 是调和和产品*j*的原料中,原料*i*的质量百分数。

1.5 全厂模型

将各个单元模型结合,其中包括4个过程的分子矩阵模型,就可以得到全厂模型。全厂模型的流程可以由图1所示。

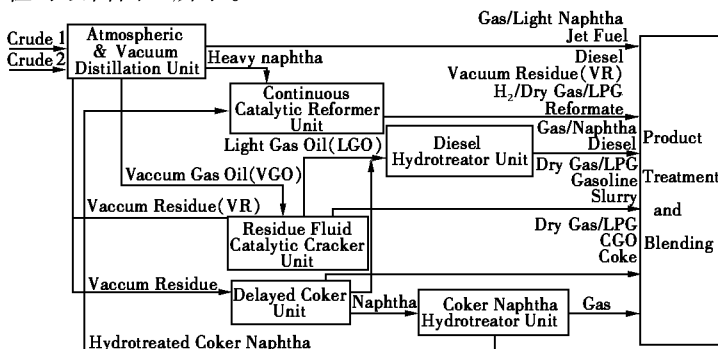


图 1 全厂生产流程图

2 全厂生产模型的优化策略

直接根据全厂模型优化求解需要处理一系列非常复杂的问题,为了解决这个难题,笔者采用 Zhang 和 Zhu^[2]提出的分解优化策略:优化的目标是工厂总利润的最大化,也可以以 RON 最大或芳烃值最小为优化目标;下面的模型中是以利润最大为目标函数,约束条件中包括所有的单元模型。本优化方法把全厂模型分成2个层次:总厂模型(主模型)和单元过程模型(子模型)。主模型需要确定所有单元过程的共同问题,例如原料的选择、公用工程与配置等。然后子模型对单元生产过程进行优化。子模型得到的优化结果将被反馈给主模型进行下一步的优化。当优化目标收敛于一点的时候,上述优化过程结束,如图2所示。

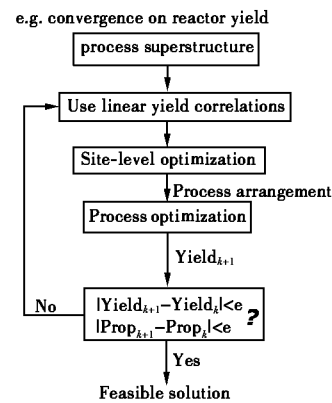


图 2 全厂优化流程图

通过这个循环,单元生产过程模型对主模型的优化起约束作用。炼油厂的总厂优化目标是总利润最大即式(2),式(2)中第一项和第二项是指产品的销售和原料成本,第三项是操作费用。

$$\max \text{profit} = \sum_k \sum_n \sum_i C_{j,k} F_{j,n,k} - \sum_k \sum_n \sum_i C_{i,k} F_{i,n,k} - \sum_k \sum_r C_r Q_{r,k} \quad (2)$$

主模型的约束条件除来自子模型外,还需要考虑的约束条件包括:生产能力、市场需求、产品规格、排放控制等,即式(3)~式(10)。

$$\text{流量约束 } F_{i,n,k}^L \leq F_{i,n,k} \leq F_{i,n,k}^U \quad (3)$$

$$\text{组成约束 } x_{i,k}^L \leq \sum_n x_{i,n,k} \leq x_{i,k}^U \quad (4)$$

$$\text{总流量约束 } F_k^L \leq \sum_n \sum_i F_{i,n,k} \leq F_k^U \quad (5)$$

$$\text{物性约束 } p_{i,k}^L \leq p_{i,k} \leq p_{i,k}^U \quad (6)$$

$$q_{i,k}^L \leq q_{i,k} \leq q_{i,k}^U \quad (7)$$

$$\text{资源约束 } Q^L \leq Q \leq Q^U \quad (8)$$

$$\text{苯含量约束 } B^L \leq B \leq B^U \quad (9)$$

$$\text{芳烃含量约束 } A^L \leq A \leq A^U \quad (10)$$

在主模型中考虑单元过程时,某一单元过程 k 包括一组进料物流 i 及其相应的物性 $p_{i,n,k}$ 和一组产品物流 j 及相应的物性 $q_{j,n,k}$, 每种产品物流 j 的物料平衡及其物性由式 (11) 给出, 这里 $f(F_{i,n,k}, p_{i,n,k}, OP_k)$ 与独立单元过程有关。此函数关系包括动力学方程、热力学方程、流体力学方程, 而且大部分方程是高度非线性的。

$$(F_{j,n,k}, q_{j,k}) = f(F_{i,n,k}, p_{i,n,k}, OP_k) \quad (11)$$

为了精确地评价每个过程的效果,资源消耗必须考虑在内,见式(12)。

$$Q_{n,k} = g(F_{i,n,k}, p_{i,n,k}, OP_k) \quad (12)$$

在分解优化策略里,式(11)和式(12)不能直接应用于主模型,否则将带来大量复杂的计算,所以在单元过程中应用线性产率和进料关联式,即式(13)和式(14)。由于该关联式是由子模型的差分近似得到,可能导致很大的误差,所以要不断地根据过程模拟校正线性关联参数 α 和 β 以减小误差。

$$F_{j,n,k} = \sum_i \alpha_{j,i,n,k} F_{i,n,k} \quad (13)$$

$$Q_{n,k} = \sum_i \beta_{i,n,k} F_{i,n,k} \quad (14)$$

综上,得到的主模型中包括方程(2)~(10)及(13)和(14),以及过程连接方程、分离和混合方程。在建立了单元生产过程子模型后,可以将这些子模型集成到全厂主模型中。主模型的优化是根据单元过程中的物性和流量确定最佳的进料条件,这里的物性和流量已经在子模型优化过程中得出,进一步推出优化所需的组成数据(分子矩阵^[1]),用来计算

单元操作的最佳条件(温度和压力等)。优化过程中得到的结果是分子矩阵的形式,它可以再次转换为物流性质,然后与其他单元过程优化结果集成,图 3 表示这一过程。

对于非分子矩阵模型,主模型给出的物性和流量数据可直接用于那些模型的优化计算。应用物性与分子组成的转换方法^[1]可以进行分子矩阵模型和非分子矩阵模型的连接。理想中我们希望对所有过程建立分子矩阵模型,在此层次上进行全厂优化。这将花费太多的时间,而对一些过程这样处理是没有必要的。在主要的单元生产过程中开发应用分子矩阵模型,使它的优点在优化过程中体现出来,可以把分子矩阵模型和非分子矩阵模型结合起来进行全厂模型优化计算。

3 单元过程分子矩阵模型与全厂优化集成

3.1 重整分子矩阵模型的集成

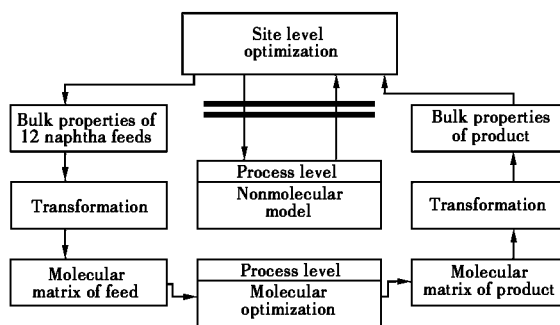


图 4 集成催化重整分子矩阵模型的全厂优化

如图 4 所示,用重整分子矩阵模型代替非分子矩阵模型。首先,由主模型优化确定物流物性和 12 种石脑油的流量,这些石脑油混合在一起,作为重整过程的进料。然后由包括重整过程在内的子模型分别优化。在重整过程优化时,12 种物流的分子矩阵已由其物性转换得出。进而得到最佳的操作条件,并给出了产物的分子矩阵,产物的分子矩阵可以转化为物性进一步优化。当主模型和子模型的收敛条件满足时,优化结束。

表 1 给出了不带分子矩阵模型和带有分子矩阵模型的全厂优化计算结果。可以看出非分子矩阵模型优化得到的结果不能给出苯和芳烃的分子数据。

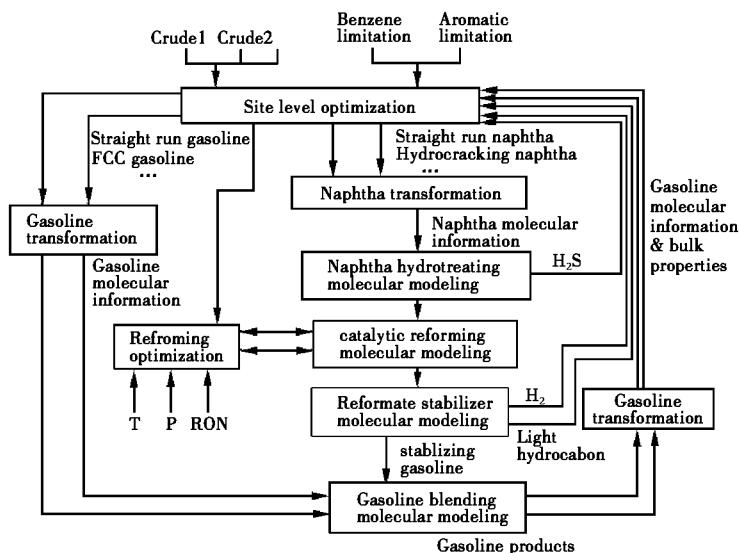


图 3 分子信息在全厂优化中的应用

表 1 集成催化重整分子矩阵模型的全厂优化结果

项目	非分子 矩阵模 型优化	分子矩阵模型优化		
		研究法辛 烷值最大	芳烃值 最小	利润最大
总利润/美元·t ⁻¹	131.76	125.89	130.63	133.04
温度/K	765	790	760.3	764.9
压力/MPa	1.42	1.34	1.46	1.31
研究法辛烷值	99.64	103.35	99.01	99.01
苯质量分数/%		5.623	5.599	5.422
芳烃质量分数/%		57.57	49.44	49.29

3.2 汽油调和模型的集成

根据新的标准,汽油中苯和芳烃的含量是有一定限制的。利用已有的催化重整、汽油调和的分子矩阵模型,可以检测和控制苯和芳烃在产物中的含量。图 5 表明了 2 个模型和总厂模型的结合。汽油的调和有 19 种可能的原料汽油,目前只有来自重整过程的那部分带有分子信息,其他的 18 股物流可以通过物性转换得到其分子组成。它们和重整后的重油一起进入调和单元生产 4 种汽油产品。产品的分子组成将转化为物性返回到主模型中进一步优化,主模型的约束条件有辛烷值以及苯和芳烃的含量。

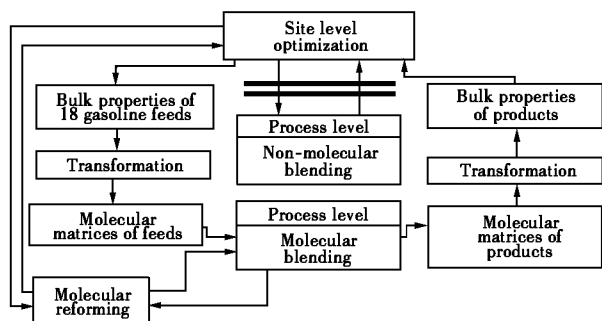


图 5 集成催化重整和汽油调和分子矩阵模型的全厂优化

进行优化计算时假定苯和芳烃的上限分别是 4% 和 40%, 辛烷值为 90、93、95 和 97 的汽油的最大流量分别是 1 500、550、450、350 kt/a。结果如表 2 所示,基准案例由于是基于非分子矩阵模型,它不能给出苯和芳烃的数据,这将会导致苯和芳烃的超标。案例 1 在调和过程中运用分子矩阵模型(可以进行苯及芳烃的控制),对催化重整过程没有使用分子矩阵模型。我们可以看出,93# 汽油的苯含量达到了上限,芳烃也接近其上限。这 2 个条件限制了 93# 汽油的产品品质,使得总利润下降。而且在此情形下,由于苯和芳烃含量的限制,不能生产 97# 汽油,这说明此情况下 97# 汽油的苯和其他芳烃浓度超过

了上限。案例 2 在案例 1 的基础上进一步结合重整过程分子矩阵模型进行了优化,通过对进料和操作条件进行处理,重整过程为调和过程提供更为理想的重整重油,在满足苯和芳烃含量标准的条件下生产出更多的产品,从而提高总收益。通过 2 个案例的比较我们可以看出,基于分子矩阵模型的优化可以增加总的收益并满足环境排放控制要求。显然,把分子矩阵模型和其他的重要过程集成在一起进行优化是更有意义的改进。

表 2 集成催化重整和汽油调和分子矩阵模型的全厂优化结果

项目	基准案例 ^①	案例 1 ^②	案例 2 ^③
总利润/美元·t ⁻¹	127.85	126.95	131.92
90# 汽油 流量/kt·a ⁻¹	1487.72	1500.0	1500.0
苯质量分数/%		2.23	2.49
芳烃质量分数/%		23.84	25.82
93# 汽油 流量/kt·a ⁻¹	0.0	361.9	430.0
苯质量分数/%		4.00	3.04
芳烃质量分数/%		39.56	30.15
95# 汽油 流量/kt·a ⁻¹	450.0	450.0	450.0
苯质量分数/%		3.63	3.88
芳烃质量分数/%		36.34	36.63
97# 汽油 流量/kt·a ⁻¹	350.0	0.0	0.0
苯质量分数/%		0.0	0.0
芳烃质量分数/%		0.0	0.0

注:①未对苯及芳烃含量进行约束;②进行苯及芳烃的约束,调和过程为分子矩阵模型,没有加入催化重整分子矩阵模型的全厂优化;③进行苯及芳烃的约束,并集成催化重整、汽油调和的分子矩阵模型的全厂优化。

4 结论

介绍了一种分子矩阵模型与炼油全厂模型结合进行优化的方法,物流可以用分子同系物矩阵来表述,矩阵的规模适中且能提供充分的化学组成信息。在此基础上进一步建立单元过程的分子矩阵模型,并与全厂优化相结合进行原料、产品和操作参数的优化。分子信息为优化提出了可行的方向,尤其对环境影响的考虑使生产在满足限制要求下尽可能生产高质量的产品和获得更大的经济效益。

参考文献

- [1] 胡山鹰,周齐宏,田玉玺,等.[J].计算机与应用化学,2004,21(1):62-72.
- [2] 周齐宏,胡山鹰,李有润,等.[J].计算机与应用化学,2004,21(3):447-452.
- [3] Zhang N, Zhu X X.[J].Computers & Chemical Engineering,2000,24,1543-1548. ■