

引用格式:刘中奇,张钧凯,杜增智,等.乙苯工艺中苯精制单元动态仿真与控制优化[J].北京化工大学学报(自然科学版),2021,48(6):1-8.

LIU ZhongQi, ZHANG JunKai, DU ZengZhi, et al. Dynamic simulation and control optimization of the benzene refining unit in an ethylbenzene process[J]. Journal of Beijing University of Chemical Technology (Natural Science), 2021, 48(6): 1-8.

乙苯工艺中苯精制单元动态仿真与控制优化

刘中奇^{1,2} 张钧凯^{1,2} 杜增智^{1,2*} 王健红^{1,2}

(北京化工大学 1. 化学工程学院; 2. 过程模拟优化中心, 北京 100029)

摘 要:乙苯是重要的有机化工原料,国内需求量大但产能不足。在苯与乙烯烷基化制取乙苯工艺中,苯精制单元作为全流程的起点,为其余单元提供原料,该工段耦合性强、控制难度大。以某企业年产 50 万吨乙苯工艺为研究对象,对苯精制单元建立动态模型,就该工艺单元的控制方案进行分析与优化。针对原控制方案在进料量发生波动时不能对塔釜组成变化作出快速响应的问题,提出了新的控制方案。通过对比分析,最终选定以灵敏板温度为主控变量来控制塔釜采出,仿真结果表明改进后的控制方案在产品纯度的控制上效果显著。

关键词:乙苯; 烷基化; 动态仿真; 控制优化

中图分类号: TP273 **DOI:** 10.13543/j.bhxbzr.2021.06.001

引 言

乙苯是重要的有机化工原料,主要用于生产苯乙烯,2020 年全球乙苯产能达到 45 Mt/a。国内的乙苯产能相对不足,2018 年国内产量 6 500 kt,约占全球乙苯产量的 20%,而需求量超过 11 000 kt^[1]。2005 年国内乙苯的自给率仅为 30%,2018 年虽已达到 70%,但是在需求量巨大的国内市场面前,仍有大量的乙苯需要进口。

目前,乙苯的生产方法主要包括分子筛气相法和分子筛液相法两种工艺。分子筛气相法生产乙苯工艺的特点是催化剂可实现原位再生,单烷基化选择性高,但是对原料乙烯的预处理要求高,流程复杂^[2]。分子筛液相法可分为 EBOne 工艺、EBMax 工艺以及 CD-TECH 工艺。EBMax 工艺是在 EBOne 工艺的基础上使用了改进的催化剂,使得工艺在较低的苯-烯比进料的情况下仍然表现出很高的单烷基化选择性。Chemical Research & Licensing 公司在 1980 年研发出催化精馏制取乙苯工艺(CD-

TECH),该工艺以精馏段为反应段,将反应热用于分离,能及时将反应产物乙苯移除,从而提高了乙苯的选择性^[3-4]。

在上述各个工艺中,都存在着苯、乙苯、非芳烃与重质物分离的苯精制单元,在此单元中苯塔(C-1101)和脱非芳塔(C-1104)构成双塔体系,两塔之间存在物质交换与能量交换,耦合性强。在工艺运行过程中,一个塔的波动也会导致另一个塔的运行情况发生变化,而且苯塔作为全流程的起点为其他 3 个单元提供进料,因此无论是从重要性还是控制难度上来说,对苯精制单元的动态特性进行研究都具有重要意义。本文针对某企业苯精制工段的控制方案进行改进与优化,提出更可靠的控制方案。当发生流量扰动时,所提方案可以降低系统内组分波动的振幅与频率,能在较短时间内将系统恢复至稳态。

1 乙苯工艺流程

本文依托于某企业 500 kt/a 液相循环法苯与乙烯烷基化制乙苯装置进行建模与分析,其工艺流程包括烷基化反应、烷基转移反应、苯精制、乙苯精馏 4 个单元,流程简图如图 1 所示。

粗苯自苯精制单元进入后脱水得到高纯苯,送入烷基化反应单元;乙烯多段进料与苯混合后在烷基化反应单元中进行反应,反应完成后送回苯精制

收稿日期:2021-05-31

基金项目:国家自然科学基金(21506007)

第一作者:男,1998 年生,硕士生

*通信联系人

E-mail: duzz@mail.buct.edu.cn

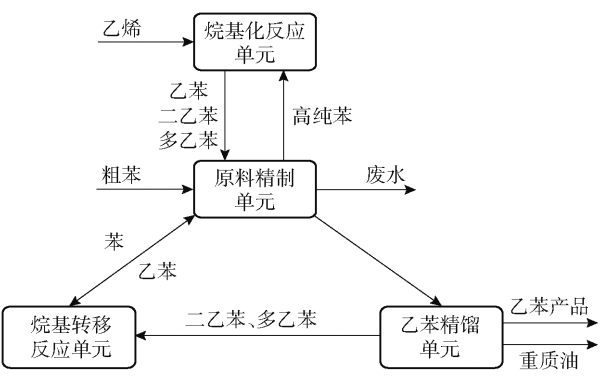


图1 苯烷基化流程图

Fig.1 Flow chart for benzene alkylation

单元;乙苯、二乙苯、多乙苯送入乙苯精馏单元,分离出乙苯产品和重质油后剩余物质再送至烷基转移反应单元;烷基转移反应单元将二乙苯、多乙苯重新转化为乙苯,提高乙苯的总收率。

2 苯精制单元建模仿真

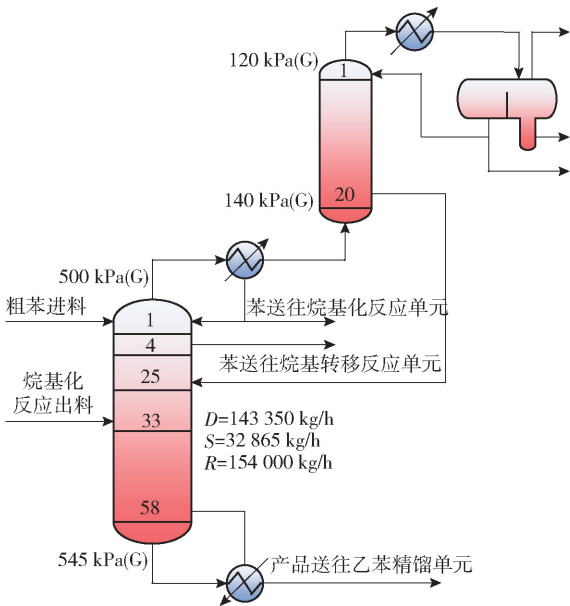
苯精制单元的入口物流分别来自粗苯进料、烷基化反应单元出口物流及烷基转移单元出口物流,具体物流组成如表1所示。

表1 苯精制单元入口物流

| 参数 | 数值 | | |
|-----------------------------|----------|-----------|------------|
| | 粗苯进料 | 烷基化反应单元出料 | 烷基转移反应单元出料 |
| 温度/℃ | 150.50 | 239.20 | 171.15 |
| 压力/kPa | 701.325 | 3746.325 | 3701.325 |
| 质量流量/(kg·h ⁻¹) | 47001.43 | 149229.36 | 48596.88 |
| 苯流量/(kg·h ⁻¹) | 46934.17 | 89867.58 | 27860.32 |
| 乙苯流量/(kg·h ⁻¹) | 0 | 50246.93 | 13093.97 |
| 二乙苯流量/(kg·h ⁻¹) | 0 | 7700.39 | 7418.12 |

苯精制单元由苯塔和脱非芳塔组成,其目的是分

离出水和轻质非芳烃,同时将苯和其余芳烃分离并分别送入其余3个单元。物料首先进入苯塔,塔顶分凝器采出的液相纯苯送入烷基化反应单元,侧线采出的粗苯送入烷基转移反应单元,塔釜采出的乙苯、二乙苯、多乙苯送入乙苯精馏单元,塔顶分凝器采出的气相从最后一块板送入脱非芳塔,脱非芳塔不设置再沸器,塔顶采用三相闪蒸罐分离出废水、轻质非芳烃以及不凝气,塔釜液相回流至苯塔。建模流程图如图2所示。



D—塔顶采出流量;S—侧线采出流量;R—回流流量;G表示相对于大气压的压力。

图2 苯精制单元建模流程图

Fig.2 Benzene refining unit simulation flow chart

此单元主要涉及到苯与苯的同系物之间的热力学计算,因此选取 Peng–Robinson 模型^[5]作为热力学模型进行计算,两塔均采用 MESH 模型^[6]进行建模,其中脱非芳塔的冷凝器为三相,用于模拟不凝气、油相及水相的分离,主要物流及设备的模拟结果如表2、3所示。

表2 苯精制单元主要物流模拟结果

Table 2 Simulation results for the main streams of the benzene refining unit

| 参数 | 苯塔塔顶气相 | | 苯塔塔顶液相 | | 脱非芳塔塔釜液相 | |
|-----------------------------|----------|----------|-----------|-----------|----------|----------|
| | 模拟值 | 设计值 | 模拟值 | 设计值 | 模拟值 | 设计值 |
| 温度/℃ | 151.36 | 148.8 | 151.36 | 151.6 | 111 | 110.6 |
| 压力/kPa | 601.325 | 601.325 | 601.325 | 601.325 | 241.325 | 241.325 |
| 质量流量/(kg·h ⁻¹) | 10999.99 | 11000 | 132349.95 | 132331.01 | 10932.38 | 10929.67 |
| 苯流量/(kg·h ⁻¹) | 10887.05 | 10877.31 | 131756.55 | 131609.97 | 10883.79 | 10861.65 |
| 非芳烃流量/(kg·h ⁻¹) | 71.56 | 88.95 | 444.24 | 513.69 | 39.09 | 56.15 |
| 水流量/(kg·h ⁻¹) | 32.17 | 24.19 | 136.23 | 174.4 | 8.98 | 10.02 |

表 3 苯精制单元设备参数模拟结果

Table 3 Simulation results for equipment parameters of the benzene refining unit

| 物理量 | C-1101 | | C-1104 | |
|---------------------------|-----------|---------|---------|---------|
| | 模拟值 | 设计值 | 模拟值 | 设计值 |
| 总板数/块 | 58 | 58 | 20 | 20 |
| 塔顶压力/kPa | 601.325 | 601.325 | 221.325 | 221.325 |
| 塔顶温度/℃ | 151.29 | 152 | 100.987 | 99 |
| 塔釜压力/kPa | 661.325 | 661.325 | 241.325 | 241.325 |
| 塔釜温度/℃ | 227.47 | 228 | 110.97 | 111 |
| 回流量/(kg·h ⁻¹) | 154 000 | 154 000 | 9 545.5 | 9 545.5 |
| 冷凝器热负荷/kW | 20 635.4 | 20 086 | 1 307.1 | 1 280 |
| 再沸器热负荷/kW | 15 384.18 | 16 190 | - | - |

3 苯精制单元动态模拟与控制优化

3.1 灵敏板选择

在设计控制策略之前,还需要寻找塔内的温度灵敏板,即在操作变量微小扰动的情况下,塔板温度变化最明显的塔板,以此控制该块塔板来达到控制塔内整体温度的目的。在塔内温度确定、压力稳定的情况下,就可以确定塔内不同位置的组分。由于动态模拟可以实时描述塔内的不同参数,更加接近实际情况,因而通过动态模拟分析寻找灵敏板比稳态模拟更加精确^[7-8]。本文采用开环灵敏度分析来选择苯塔的灵敏板,如图 3 所示,显示了苯塔回流量扰动 5% 引起的每个塔板的温度变化,可以看出第 38 块板在回流扰动时出现了最大的响应,所以选为该苯塔的灵敏板。

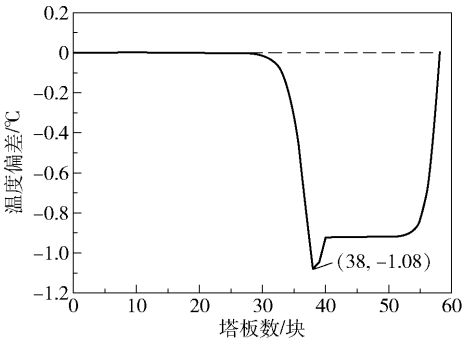


图 3 苯塔在回流扰动中的开环灵敏度分析

Fig. 3 Open loop sensitivity analysis for the benzene column during reflux disturbance

3.2 原始控制方案分析

工艺包所设计的控制方案 CS1 如图 4 所示,来自两个反应工段的原料由上游的流量控制器控制,

新鲜苯的进料需要随时根据生产能力调整。因此将粗苯的进料与 C-1101 塔顶凝液罐的液位进行串级控制,C-1101 塔顶压力由塔顶不凝气的流量控制,通过冷却水的流量控制冷凝器负荷,回流量、侧线采出量和塔顶液相采出量均通过流量控制器控制,通过蒸汽流量与灵敏板温度串级控制再沸器热负荷,通过塔釜液位与塔釜采出量串级控制塔釜采出。对于 C-1104 塔,通过冷却水流量控制塔顶温度,通过不凝气的流量控制塔顶压力,三相分离器水相/油相出口均通过液位控制实现,回流量通过流量控制器进行控制。

原始控制方案以流量控制为主,该控制方案的优点是能够在流量扰动时作出较小的震荡与较短的响应时间,但是该方案的缺点在于其对于分离效果的控制依赖接近塔釜的灵敏板温度,当扰动较大时并不能保证产品纯度控制的稳定性与响应时间。

3.3 控制方案优化

考虑到塔釜重组分较多,分离要求为苯含量控制在 10⁻⁶ 级,因此根据灵敏板对温度变化敏感的特点考虑将灵敏板温度与塔釜采出串级,塔釜液位与再沸器蒸汽流量串级来控制加热量^[9-10]。相比于原方案,当进料量开始扰动时,塔内浓度分布不能迅速地达到平衡,即该方案能够在纯度的控制上更为稳健,改进后的控制方案 CS2 如图 5(a) 所示。

在进料量扰动时,塔内的压力变化较为剧烈,原控制方案针对塔顶气相采出的管道进行控制,从阀门设备的角度考虑,气相管道的直径一般远大于液相管道,因此控制效果相对较差。对于压力的调节可以考虑将塔顶压力与回流量串级以稳定塔顶的温度及压力^[11],具体控制方案 CS3 如图 5(b) 所示。

3.4 PID 参数整定

上述所有控制器均采用比例-积分-微分 (proportional-integral-derivative, PID) 控制器,为获取较优的测试效果,采用 Ziegler-Nichols 经验公式法^[12] 整定 PID 参数。

Ziegler-Nichols 经验公式法是一种以被控对象控制通道的阶跃响应为依据,通过一些经验公式来求取 PID 控制器最佳参数整定值的开环整定方法。它采用的整定对象是一阶加纯滞后模型,通过阶跃响应求出模型参数,再反推 PID 控制器的参数。经过整定后每个控制器的 PID 参数如表 4 所示。

3.5 动态响应分析

本文分别针对原控制方案 CS1、对比控制方案

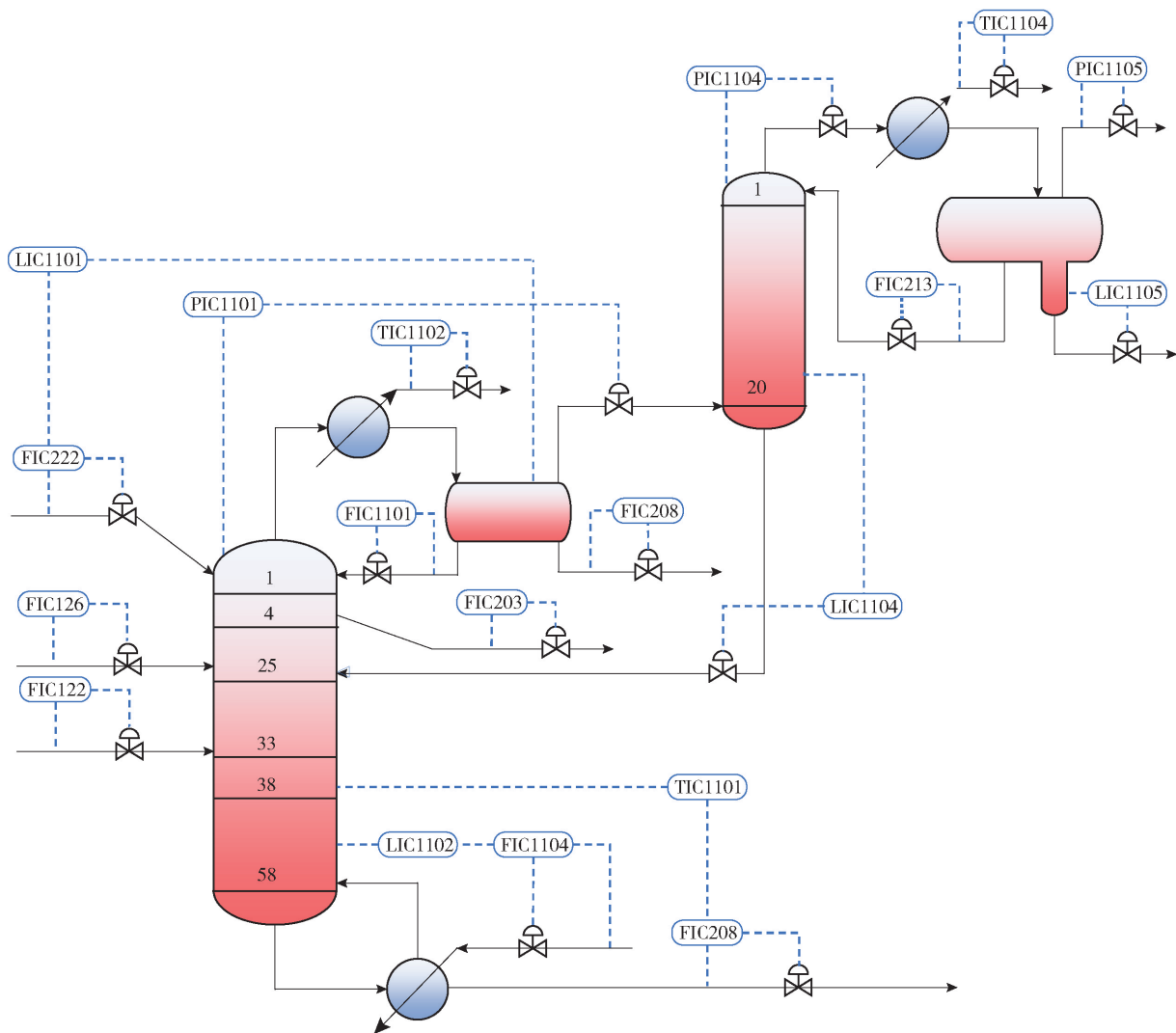


图4 原始控制方案示意图

Fig.4 Diagram of the original control scheme

CS2、对比控制方案 CS3 在稳态运行 2 h 后,对两股反应器出口流量控制器 FIC126、FIC122 引入 $\pm 20\%$ 的进料流量扰动,分析研究不同控制方案的动态特性,实验结果如图 6、7 所示。

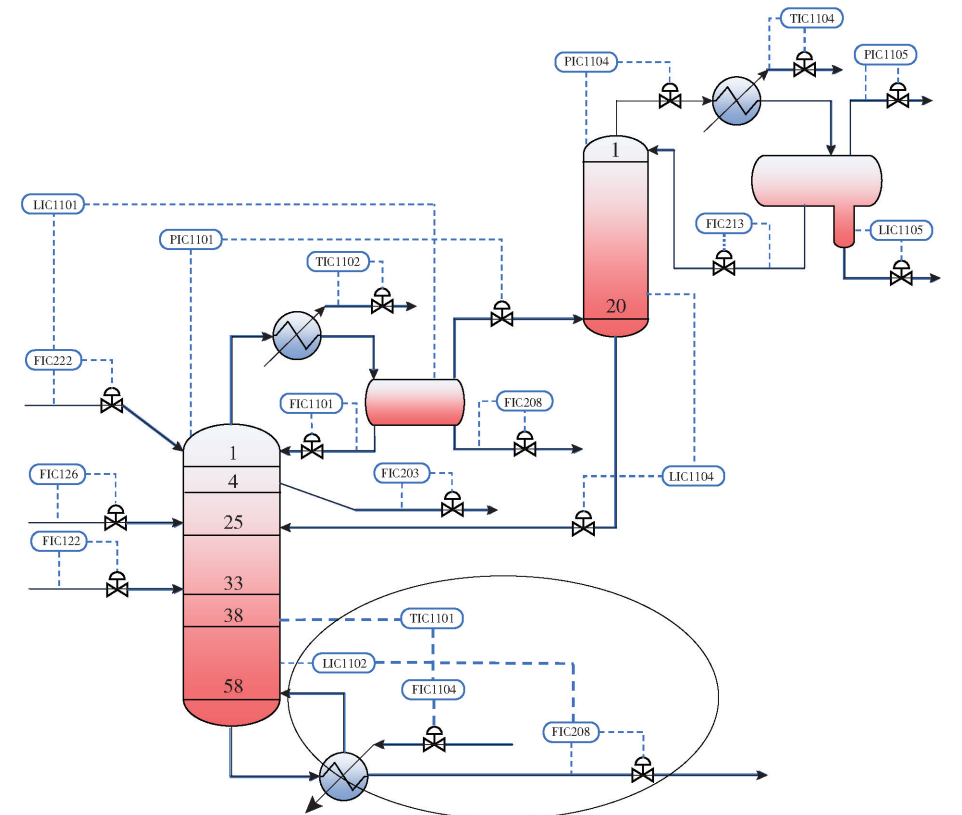
从图 7 可以看出,在进料扰动减少时,CS2 可以在 1 h 之内达到新的稳定状态且流量波动最小,仅在灵敏板温度(图 7(b))上波动较大。进料量扰动时塔内浓度分布变化较大,因此灵敏板温度出现较大波动符合其动态特性。结合图 7(c)、(d) 的浓度变化趋势可以看出,灵敏板温度变化大并不表示塔内浓度变化波动大,相反 CS2 的浓度波动最小,是控制效果最好的控制方案。因此灵敏板温度波动大体现出 CS2 对扰动响应灵敏,灵敏板的选取合适。

此外,分析 CS3 控制效果不佳的原因有如下两

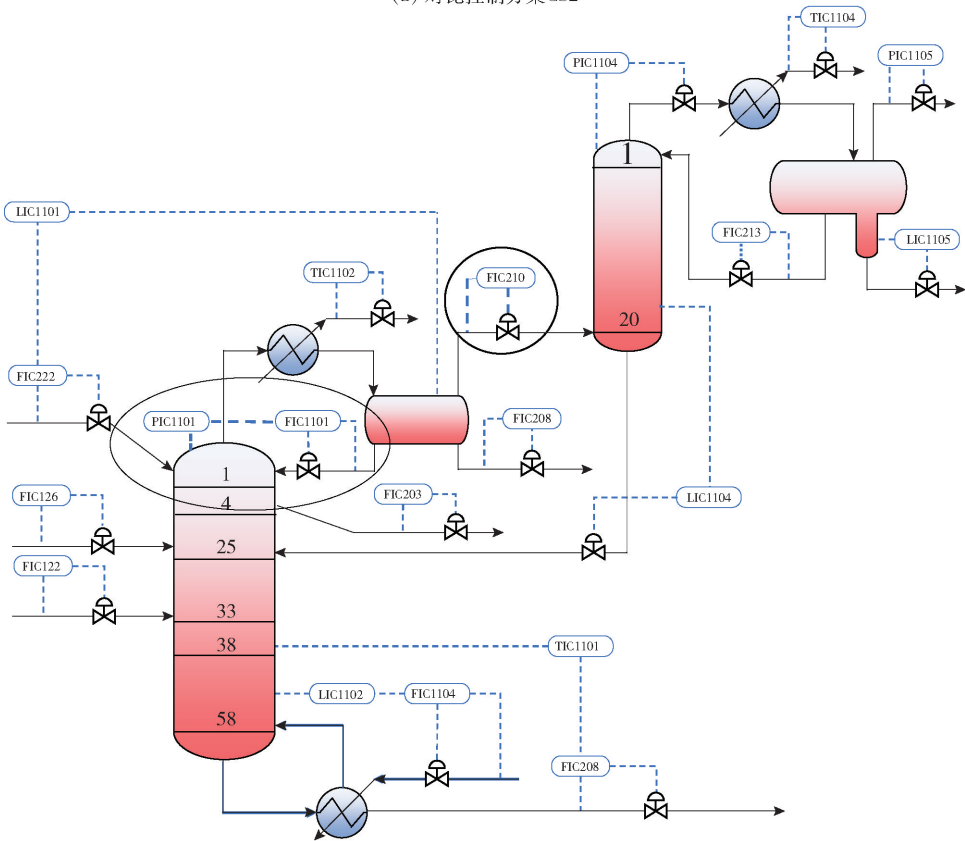
点:(1)从物系的角度考虑,芳烃物系的沸点变化对于压力不敏感,因此在内部重新建立浓度分布时,压力不能及时准确地表征塔顶的浓度变化;(2)回流量对塔顶压力影响的滞后性相对较大,PID 控制器可能不适用于此类场景。后续的研究中可以考虑采用前馈-反馈控制、自适应控制等手段达到更佳的控制效果。

从图 6 可以看出,当进料扰动增加时,CS1 与 CS2 均能在 1 h 内达到新的稳定状态且分离效果与原稳态基本保持一致,CS3 相对鲁棒性较差,且由图 6(c)、(d) 分析,CS3 对分离效果也产生一定的削弱作用,因此 CS3 的控制效果不如 CS1、CS2。

随后进一步对比 CS1 与 CS2 的控制效果,从图 6(a)、(b) 可以发现 CS1 在扰动过程中对流量、温度等操作参数产生的震荡较小,但是分析



(a) 对比控制方案CS2



(b) 对比控制方案CS3

图 5 对比控制方案示意图

Fig. 5 Diagram of the comparison control scheme

表 4 控制器 PID 参数
Table 4 PID controller parameters

| 控制器位号 | P/% | I/min | D/min |
|---------|-----------|-----------|-------|
| FIC222 | 0.592 75 | 1.200 92 | 0 |
| FIC126 | 0.458 31 | 3.992 09 | 0 |
| FIC122 | 0.598 19 | 1.187 71 | 0 |
| TIC1102 | 0.588 26 | 1.200 05 | 0 |
| PIC1101 | 41.842 22 | 9.733 00 | 0 |
| LIC1101 | 35.370 89 | 4.480 51 | 0 |
| FIC1101 | 0.588 26 | 1.200 06 | 0 |
| LIC1102 | 0.091 81 | 0.906 31 | 0 |
| FIC208 | 0.184 51 | 3.996 00 | 0 |
| FIC203 | 0.241 98 | 1.194 43 | 0 |
| FIC220 | 0.466 83 | 0.818 15 | 0 |
| LIC1104 | 0.731 28 | 6.601 92 | 0 |
| PIC1104 | 5.194 84 | 1.502 08 | 0 |
| TIC1104 | 0.145 95 | 1.419 87 | 0 |
| PIC1105 | 32.981 41 | 18.770 14 | 0 |
| LIC1105 | 14.031 14 | 10.754 06 | 0 |
| LIC1106 | 15.882 75 | 2.661 84 | 0 |
| FIC213 | 65.214 89 | 0.441 07 | 0 |

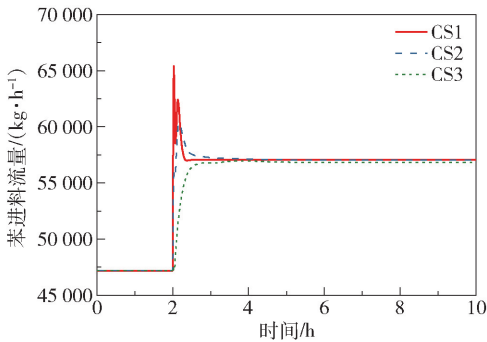
P 表示比例增益,I 表示积分增益,D 表示微分增益。

图 6(c)、(d),可以看出 CS1 对分离效果产生的震荡与偏差相对较大,表明 CS2 是对产品纯度较为敏感的控制方案。在生产过程中,往往会在关键设备之后加入缓冲储罐,因此相较于产品流量,纯度是更重要的控制指标,即 CS2 是更稳健的控制方案。

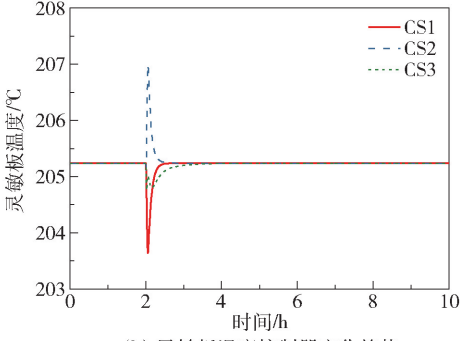
同时对比图 6(c)、图 6(d)、图 7(c)、图 7(d),分析增加和减小进料流量对浓度分布的影响,可以得出在回流比不变的情况下并不能保证分离效果与稳态计算的结果一致,这可能是因为当塔内构件的参数不变时,塔负荷也会影响塔板效率,在负荷较大时塔板的处理量大,每一块塔板的效率变低,导致总的理论级数变小,从而需要更大的回流比来维持分离效率。

4 结论

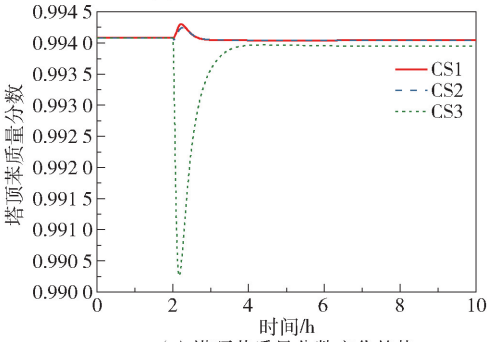
本文根据液相循环法苯与乙烯烷基化工艺的技术特点,结合操作单元组成及特性,选择适当的单元模块对苯精制进行了稳态与动态仿真模拟,并将稳态流程模拟结果与工艺设计值进行了比对,验证了工艺流程建模的合理性与准确性。



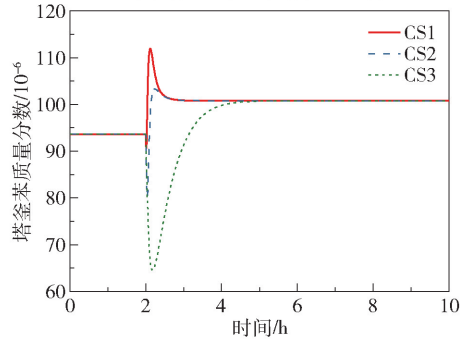
(a) 苯进料流量控制器变化趋势



(b) 灵敏板温度控制器变化趋势



(c) 塔顶苯质量分数变化趋势



(d) 塔釜苯质量分数变化趋势

图 6 +20% 进料流量下控制器变化趋势
Fig. 6 Effect of +20% feed flow rate disturbance on the controllers

通过对苯精制单元动态特性的分析,针对原控制方案对纯度的扰动不稳健和对气相管线控制不灵敏的缺陷,提出采用灵敏板温度控制塔釜采出的改进控制方案。进料流量扰动的对比分析结果表明,改进后的控制方案对于扰动的响应更灵敏,产品纯

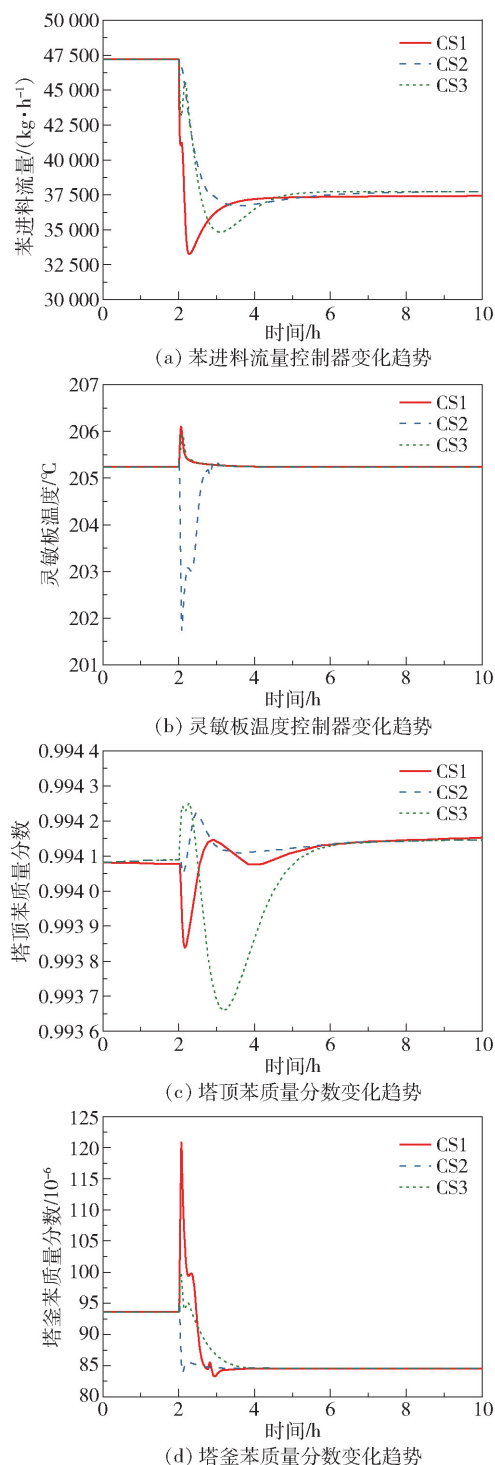


图7 -20%进料流量下控制器变化趋势

Fig. 7 Effect of -20% feed flow rate disturbance on the controllers

度的波动更小,控制效果优于原控制方案。

参考文献:

[1] 孙洪敏. 乙苯生产技术与市场分析[J]. 石油化工技

术与经济,2019,35(5):18-23.

SUN H M. Ethylbenzene production technology and market analysis[J]. Technology & Economics in Petrochemicals, 2019, 35(5): 18-23. (in Chinese)

[2] 张钧凯,杜增智,王璟德,等. 乙苯装置虚拟仿真数字工厂的开发与应用[C]//第二届全国过程模拟与仿真学术会议. 北京,2020.

ZHANG J K, DU Z Z, WANG J D, et al. Development and application of simulation factory for ethylbenzene process[C]//Second National Conference on Process Modeling and Simulation. Beijing, 2020. (in Chinese)

[3] JR SMITH L A, TEX H. Catalytic distillation process: US 4232177[P]. 1980-11-04.

[4] WILSON A S S, HILL M S, MAHON M F, et al. Organocalcium-mediated nucleophilic alkylation of benzene[J]. Science, 2017, 358(6367): 1168-1171.

[5] GUO J Z, LIU T, DAI Y C, et al. Vapor-liquid equilibria of benzene and propylene under elevated temperature and pressure[J]. Journal of Chemical & Engineering Data, 2001, 46(3): 668-670.

[6] MINCEVA M, RODRIGUES A E. Modeling and simulation of a simulated moving bed for the separation of p-xylene[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2002, 41(14): 3454-3461.

[7] LUYBEN W L. Design and control of stacked-column distillation systems[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2014, 53(33): 13139-13145.

[8] TSAI M L, CHIEN I L. Design and control of an energy-efficient process for the separation of benzene/isopropanol/water ternary mixture[J]. Separation and Purification Technology, 2021, 255: 117694.

[9] 王晓红,谢力,张远鹏,等. 带有中间储罐的间歇精馏的动态模拟与控制[J]. 青岛科技大学学报(自然科学版),2018,39(2): 37-43.

WANG X H, XIE L, ZHANG Y P, et al. Dynamic simulation and control of a middle vessel batch distillation process[J]. Journal of Qingdao University of Science and Technology (Natural Science Edition), 2018, 39(2): 37-43. (in Chinese)

[10] VIBHUTE M M, JOGWAR S S. Optimal operation and tracking control of vapor-recompressed batch distillation[J]. AIChE Journal, 2020, 66(12): e17049.

[11] BABU A S, LONDHE B. Dynamics of ethyl benzene synthesis using Aspen dynamics[J]. International Journal of Scientific Engineering and Technology, 2014, 3(7): 946-950.

- [12] MESHARAM P M, KANOJIYA R G. Tuning of PID controller using Ziegler-Nichols method for speed control of DC motor[C]//International Conference on Advances in

Engineering, Science and Management (ICAESM – 2012). Nagapattinam, 2012: 117 – 122.

Dynamic simulation and control optimization of the benzene refining unit in an ethylbenzene process

LIU ZhongQi^{1,2} ZHANG JunKai^{1,2} DU ZengZhi^{1,2*} WANG JianHong^{1,2}

(1. College of Chemical Engineering; 2. Center for Process Simulation & Optimization,
Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China)

Abstract: Ethylbenzene is an important organic chemical raw material. Although domestic demand in China is high, the production capacity is insufficient. In the formation of ethylbenzene by alkylation of benzene with ethylene, the benzene refining unit serves as the starting point of the whole process and provides feeds for the remaining units. However this section has strong coupling and is difficult to control. In this work, an enterprise with an annual output of 500 000 tons of ethylbenzene is chosen as the research object, a dynamic model of the benzene refining unit is established, and the control scheme of the process unit is analyzed and optimized. In an attempt to overcome the problem that the original control scheme cannot respond quickly to the changes in the composition of the tower when the feed volume fluctuates, a new control scheme is proposed. Through a comparative study, the temperature of the sensitive tray is selected as the main control variable to control the extraction at the bottom of the tower. The simulation results show that the improved control scheme is more effective in allowing control of product purity.

Key words: ethylbenzene; alkylation; dynamic simulation; control optimization

(责任编辑:吴万玲)