

氯乙烯精馏过程的 ASPEN PLUS 模拟分析

李群生 刘 阳

(北京化工大学化学工程学院, 北京 100029)

摘 要: 应用化工流程模拟软件 ASPEN PLUS 对聚氯乙烯生产工艺中氯乙烯精馏过程进行模拟。通过比较, 选用 NRTL 方程来计算液相活度系数, 所得模拟结果与实际生产值基本吻合。对低沸塔和高沸塔的操作变量进行了灵敏度分析, 得到高低沸塔适宜进料位置、回流比和馏出比分别是 8 和 2, 0.5 和 0.8 以及 0.93 和 0.25。

关键词: ASPEN PLUS; 氯乙烯; 精馏; 模拟计算

中图分类号: TQ018

引 言

近几年来, 聚氯乙烯(PVC)的应用范围越来越广, 需求也在逐年增长。目前, 国内的生产产量已经不能满足市场需要^[1], 故优化 PVC 生产装置有很大的意义^[2]。氯乙烯(VC)精馏过程是 PVC 生产中的重要环节^[3], 是 PVC 进一步发展的重要课题。

对 VC 精馏过程的分析研究, 前人主要采用不同的化工流程模拟软件对热力学模型的讨论及对精馏塔进行物料及热量的衡算^[4-7], 缺乏对操作参数对于整个系统的影响的分析。本文应用大型化工流程模拟软件 ASPEN PLUS^[8-9]对 VC 的精馏过程做全流程静态模拟, 并对进料位置、回流比和馏出比等重要操作参数做灵敏度分析。

1 工艺流程及工艺参数

氯乙烯精馏系统由低沸塔和高沸塔组成, 工艺流程如图 1 所示。粗氯乙烯原料先进入低沸塔(T1)后塔釜馏出经缓冲槽(B)进入高沸塔(T2)。进料液中 VC 摩尔分数为 98.76%; 重组分以 1,2-二氯乙烷(EDC)计, 摩尔分数为 0.53%; 轻组分以乙炔计(C_2H_2), 摩尔分数为 0.11%; 其余为水。其中 C_2H_2 等低沸点杂质用低沸塔去除, EDC 等高沸点杂质用高沸塔去除, 精 VC 由高沸塔塔顶产出。低

沸塔进料量为 488.02 kmol/h; 塔釜操作压力为 0.6 MPa; 塔板效率 0.8; 塔板数 46; 进料位置在第 26 块塔板。高沸塔塔釜操作压力为 0.25 MPa; 塔板效率 0.8; 塔板数 38; 进料位置在第 4 块塔板。

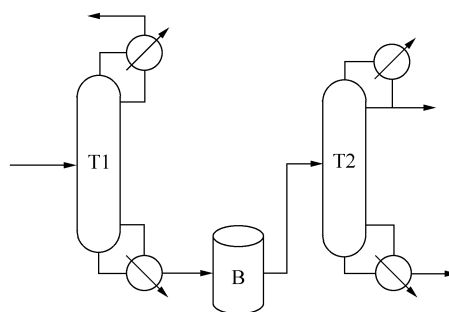


图 1 VC 精馏系统流程图

Fig. 1 Flow chart of the vinyl chloride rectification process

2 热力学模型及模拟结果

选择的数学模型是否恰当, 将直接影响所计算的物性的准确程度^[10], 从而影响到计算结果的精确度。ASPEN PLUS 软件提供的威尔逊方程(WILSON), 有规双液方程(NRTL), 通用似化学方程(UNIQUAC)3 种模型都适用于该体系的分离模拟计算^[11]。表 1 列出高低沸塔的模拟采用 3 种不同的活度系数模型计算得到的结果。

表 1 的计算结果表明用 NRTL 模型计算的结果与生产实际拟合的最好, 因此氯乙烯塔的模拟计算确定选取 NRTL 模型^[12]。选用 ASPEN PLUS 中的严格模拟(Radfrac)模块对静态模拟精馏过程有着非常好的效果^[13]。通过表 1 比较同样可以看出, 运用 NRTL 模型计算得到的结果与实际运行结果相近, 该模拟数据具有指导性。

收稿日期: 2008-04-02

基金项目: 国家自然科学基金(20476005); 国家“863”计划(2006BA109B07-01); 中国石化股份有限公司资助项目(XS01021)

第一作者: 男, 1963 年生, 教授

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

表 1 热力学方程计算结果比较

Table 1 Comparison of simulation results computed by three thermodynamic equations

塔型	组成	x							
		设计		WILSON		NRTL		UNIQUAC	
		塔顶	塔底	塔顶	塔底	塔顶	塔底	塔顶	塔底
低沸塔	VC	0.95	0.9925	0.997	0.9988	0.974	0.9993	0.997	0.9986
	EDC	0	7×10^{-4}	4×10^{-6}	0.001	1.9×10^{-6}	3.75×10^{-4}	4×10^{-6}	0.001
	C ₂ H ₂	0.02	0	0.0022	0	0.026	痕量	0.0022	痕量
高沸塔	VC	0.9874	0	0.9997	1.62×10^{-4}	0.9999	3.017×10^{-5}	0.9998	0.0028
	EDC	0	0.9624	2.11×10^{-4}	0.635	2.6×10^{-6}	0.9869	2.03×10^{-4}	0.809
	H ₂ O	0	0.011	0.364	0.364	痕量	0.0129	2.5×10^{-7}	0.1875

3 灵敏度分析

使用 ASPEN PLUS 中的灵敏度分析工具,可以方便地确定过程对关键操作变量和设计变量的响应^[14]。因此对氯乙烯的精馏系统模拟过程使用灵敏度分析进行不同工艺参数条件下对象静态特性的研究。

3.1 进料位置分析

优化的过程应该先对进料位置(N_F)进行分析,因为在保证分离效果一定的情况下,最佳进料位置对应的才是最小的回流比。用塔釜出料中 VC 的摩尔分数来衡量低沸塔分离效果,图 2 是低沸塔进料位置与塔釜 VC 摩尔分数关系图。

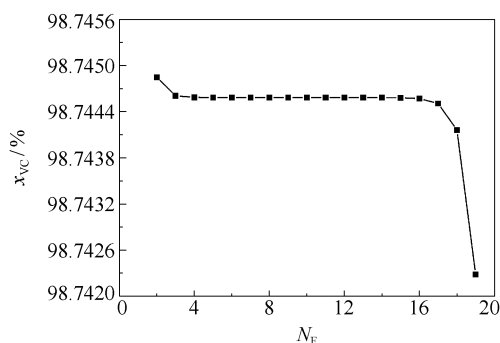
图 2 低沸塔 N_F 与 x_{VC} 的关系

Fig. 2 Relation between feed location and VC content at the tower bottom for the low-boiler tower

从图 2 中可以看出随着 N_F 的下移,塔釜 VC 摩尔分数(x_{VC})逐渐减少。当在 3~15 块塔板进料时,塔釜 x_{VC} 基本不变;而当 N_F 大于 15 时,塔釜 x_{VC} 迅速减小,并在 N_F 为 19 时达到最小值 98.742%。冷凝器和再沸器的负荷随 N_F 的下移而增大,因此在保证塔釜出料纯度的前提下,为尽量降

低低沸塔的操作费用,选择第 2 块塔板进料。

图 3 是高沸塔 N_F 与塔顶 x_{VC} 的关系图。模拟研究的结果表明, N_F 在第 6 块板以上不能保证有足够的精馏段。而当进料板数从 5 增大到 11,塔顶 x_{VC} 基本保持在 99.384% 附近。在回流比一定的情况下,当在大于第 11 块进料时,塔顶 VC 含量逐渐降低,并在 N_F 为 23 时达到最低 99.377%。随着进料板位置的下移,冷凝器和再沸器的负荷先减小后增大。为降低塔釜残液中的 VC 含量, N_F 不宜太低。因此, N_F 选在第 8 块板为宜。

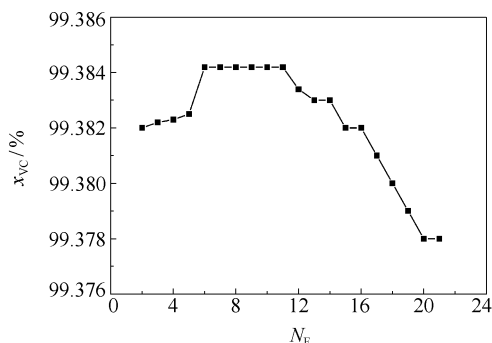
图 3 高沸塔 N_F 与塔顶 x_{VC} 的关系

Fig. 3 Relation between feed location and VC content at the tower bottom for the high-boiler tower

3.2 回流比分析

在塔板数和进料位置不变的条件下,减少回流比会使产品的质量下降;增大回流比会使产品质量上升,但是冷凝器和塔釜加热量也会增加,因此控制合适的回流比是至关重要的。

选定低沸塔在第 2 块板进料,做回流比对冷凝器再沸器换热量的灵敏度分析。图 4 是低沸塔回流比和冷凝器及再沸器换热量关系图。从图 4 可以看出回流比(R)的变化对热负荷的影响很大,回流比

自 0.1 升高到 2.0 时, 冷凝器负荷 (Q_C) 增大 2.209 GJ/h, 再沸器负荷 (Q_R) 增大 2.211 GJ/h。这是因为冷凝量和回流比增加, 势必使塔釜温度下降而影响塔底混合物组成, 因此又必须相应的增加塔釜加热蒸发量, 能量消耗增加。 R 也不宜过小, 因为 R 减小则气液相间传质推动力减小, 产品质量受到影响。分析得适宜回流比为 0.8。

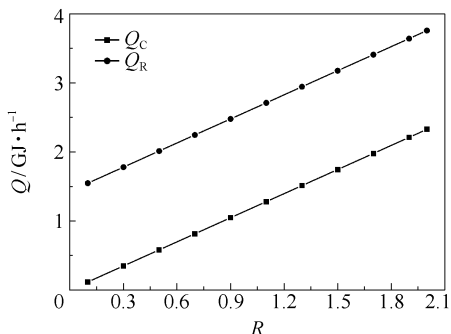


图 4 低沸塔 R 与 Q_R 及 Q_C 的关系

Fig. 4 Relation between reflux ratio, reboiler and condenser duties for the low-boiler tower

当在第 8 块板进料时, 对高沸塔做回流比的灵敏度分析。图 5 为高沸塔回流比和换热量关系图。从图 5 中可以看出随着 R 的增大, 冷凝及再沸器的负荷均在急剧增大, 当 R 从 0.1 增加至 2.0 时, 冷凝器换热量从 1.24 GJ/h 增至 3.55 GJ/h, 再沸器负荷从 1.33 GJ/h 增大至 3.64 GJ/h。同时, 回流比增大, 塔顶氯乙烯的含量增大, 且当回流比大于 0.5 时, 增大幅度明显减小。通过以上分析知 0.5 是适宜回流比。

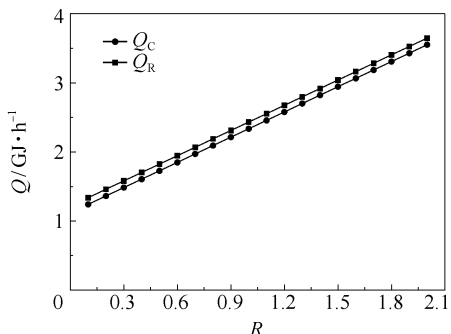


图 5 高沸塔 R 与 Q_R 及 Q_C 关系

Fig. 5 Relation between reflux ratio, reboiler and condenser duties for the high-boiler tower

3.3 馏出比分析

对低沸塔的馏出比 (D/F) 进行灵敏度分析, 图 6 为低沸塔 D/F 和塔釜 x_{VC} 关系图。由图 6 中可以

看出, 随着馏出比的增加, 塔釜出料的 VC 摩尔分数先增大后减小, 当馏出比为 0.3 时, 其值为 98.57% 达到最大。 D/F 增加, 会增大冷凝器再沸器的负荷, 因此可以考虑在塔釜出料 x_{VC} 较高时选择合适的馏出比, 由图 6 知选择 0.25。

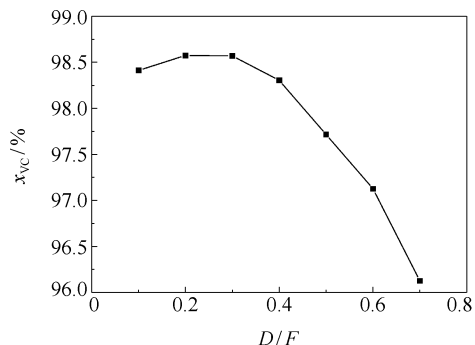


图 6 低沸塔 D/F 与塔釜 x_{VC} 的关系

Fig. 6 Relation between distillate to feed ratio and VC content at the tower bottom for the low-boiler tower

图 7 是高沸塔 D/F 与塔顶 x_{VC} 关系图。由图 7 可以看出, 对于高沸塔, 随着塔顶 D/F 的增加, 塔顶出料 x_{VC} 起初变化不大, 后减小。塔顶 x_{VC} 最大值为 99.5656%, 此时高沸塔馏出比为 0.93。考虑到尽量满足生产要求和减少操作热负荷, 可知 0.93 是适宜馏出比。

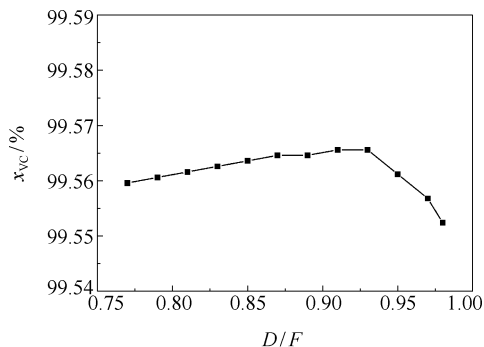


图 7 高沸塔 D/F 与塔顶 x_{VC} 的关系

Fig. 7 Relation between distillate to feed ratio and VC content at the tower top for the high-boiler tower

4 结论

(1) 通过 ASPEN PLUS 对氯乙烯精馏系统模拟计算, 选用 NRTL 方程计算气液相行为。其计算结果与实际运行结果基本吻合, 可用于指导工业生产。

(2) 通过 ASPEN PLUS 的灵敏度分析等优化功能, 得到适宜操作参数。对于低沸塔适宜的进料

板数、回流比和馏出比分别是 2, 0.8 和 0.25; 对于高沸塔适宜的进料板数、回流比和馏出比分别是 8, 0.5 和 0.93。

参考文献:

- [1] 钱伯章, 朱建芳. 聚氯乙烯的市场分析和进展[J]. 中国氯碱, 2005(11): 1-5.
- [2] 刘志强. 如何看待电石法 PVC 发展[J]. 聚氯乙烯, 2006(6): 45-46.
- [3] 王伯英. 聚氯乙烯大全: 第二卷[M]. 北京: 化学工业出版社, 1985.
- [4] 王文庆, 李延辉. Aspen 软件在大型聚乙烯装置上的应用[J]. 合成树脂及塑料, 2004, 21(3): 43-46.
- [5] 杨国恒, 彭昌军, 何秉忠. 氯乙烯精馏塔的计算[J]. 武汉化工学院学报, 1999, 21(4): 13-16.
- [6] 吴雪妹. 氯乙烯精馏中低沸塔系统的物料衡算——电算法[J]. 聚氯乙烯, 2001(1): 49-56.
- [7] 廖丽华. 氯乙烯精制装置流程模拟[J]. 氯碱工业, 1994(11): 22-23.
- [8] 赵琛琛. 工业系统流程模拟利器——Aspen Plus[J]. 电站系统工程, 2003, 19(2): 56-58.
- [9] 谢安俊, 刘世军, 张华岩, 等. 大型化工流程模拟软件——Aspen Plus[J]. 石油与天然气化工, 1995, 24(4): 247-251.
- [10] 戚一文, 放运进. 物性估算在 ASPEN PLUS 软件中的应用[J]. 浙江化工, 2007, 38(1): 9-11.
- [11] The Aspen Technology Inc. Aspen plus 12.1 getting started using equation oriented modeling [M/OL]. [2007-10-05]. <http://www.aspentech.com>.
- [12] 郑丹星. 化工热力学教程[M]. 北京: 中国石化出版社, 2000.
- [13] 谢扬, 沈庆扬. ASPEN PLUS 化工模拟系统在精馏过程中的应用[J]. 化工生产与技术, 1999, 6(3): 17-22.
- [14] 屈一新. 化工过程数值模拟及软件[M]. 北京: 化学工业出版社, 2006.

Application of ASPEN PLUS in vinyl chloride rectification

LI QunSheng LIU Yang

(College of Chemical Engineering, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China)

Abstract: ASPEN PLUS has been used to simulate the vinyl chloride rectification process for producing polyvinyl chloride. For comparison, the NRTL thermodynamic model was selected to calculate the activity coefficients. The simulation results obtained showed good agreement with the plant data. In addition, the operating parameters of the high-boiler tower and the low-boiler tower were optimized based on sensitivity analysis. The optimized data are feed location 8, 2, reflux ratio 0.5, 0.8 and distillate to feed ratio 0.93, 0.25 respectively.

Key words: ASPEN PLUS; vinyl chloride; rectification; simulation