

КАЗАНСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНСТИТУТ ГЕОЛОГИИ И НЕФТЕГАЗОВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ
Кафедра технологии нефти, газа и углеродных материалов

Д.З. Валиев, А.Г.-Х. Алфаяд, Р.А. Кемалов

**МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕАКТОРНОГО БЛОКА
УСТАНОВКИ ИЗОМЕРИЗАЦИИ В ASPEN HYSYS**

Учебно-методическое пособие



Казань
2023

УДК 547.211

ББК 65.01

*Печатается по решению учебно-методической комиссии
ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет»
Института геологии и нефтегазовых технологий
Протокол №1 от 11 октября 2023 г.
Заседания кафедры технологии нефти, газа и углеродных материалов
Протокол № 6 от 26 июня 2023 года*

Рецензенты:

кандидат технических наук, ведущий специалист ПАО «Транснефть»

Борисов С.В.

кандидат химических наук, доцент КФУ Ибрагимова Д.А.

Валиев Д.З.

Моделирование реакторного блока установки изомеризации в Aspen Hysys: учебно-методическое пособие / Д.З. Валиев, А.Г.-Х. Алфаяд, Р.А. Кемалов – Казань: Казанский федеральный университет, 2023. – 26 с.

В данной работе изложены принципы моделирования реакторного блока Penex установки изомеризации в Aspen Hysys.

Учебное пособие предназначено для студентов, которые обучаются в бакалавриате, магистратуре, аспирантуре по направлениям подготовки «Нефтегазовое дело» и может быть использовано в системах непрерывного профессионального образования по компьютерным технологиям.

© Валиев Д.З., 2023

© Казанский федеральный университет, 2023

Оглавление

ВВЕДЕНИЕ.....	4
1 Процесс изомеризации.....	7
2 Описание моделирования модели технологической схемы установки в Aspen HYSYS.....	10
2.1 Этапы моделирования технологической схемы установки в Aspen HYSYS	10
2.1.1 Задание перечня компонентов и выбор метода расчета свойств смесей	10
2.2 Задание перечня аппаратов и схемы их коммутации	13
2.2.1 Добавление материальных потоков в схему установки.....	15
2.3 Задание состава потока.....	16
Вывод.....	24
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	25
Литература	26

ВВЕДЕНИЕ

Изомеризат, продукт установки изомеризации, представляет собой компонент смеси бензина с высоким октановым числом, характеризующийся низким (или отсутствующим вообще) содержанием ароматических веществ и серы, который также удовлетворяет как экономические, так и экологические требования. На качество изомеризата влияет ряд параметров, таких как состав сырья, параметры процесса, внимание инженера-технолога к повседневной работе и т.д. оптимизирован инженером-технологом. Во время оптимизации температуры на выходе из реактора регулируются в ведущем и ведомом реакторах, чтобы максимизировать скорость реакции в ведущем реакторе и управлять равновесными концентрациями в ведомом реакторе. Эта комбинация максимизирует желаемое соотношение компонентов продукта, так называемое изо-соотношение. Оптимальный вариант можно выбрать из двух вариантов: произвести максимальное количество баррелей изомеризата (максимальный выход жидкости) или произвести максимальное октановое число продукта. В этом учебном пособии рассматриваются возможность моделирования реактора Penex и установки изомеризации в Aspen Hysys. Схема реактора Penex представлена на рисунке 2.

Установка предназначена для непрерывной каталитической изомеризации пентанов, гексанов и их смесей. Реакции протекают в атмосфере водорода, над неподвижным слоем катализатора и в рабочих условиях, которые способствуют изомеризации и сводят к минимуму гидрокрекинг. В состав установки входят колонна деизопентанизатора, осушители жидкого сырья и подпиточного газа, реакторы Penex (ведущий и отстающий), стабилизатор продукта, щелочной скруббер и колонна деизогексанизатора, как показано на рисунках 1 и 2. Расчетные данные представляют собой основу для расчетов, обеспечивающих эффективную работу агрегата. Но необходимо было дополнительно оптимизировать работу реакторов и активность катализатора в отношении реального сырья, перерабатываемого на установке.

На качество продукта установки изомеризации (изомеризации) влияет несколько факторов, таких как состав сырья, параметры процесса, ориентация инженеров-технологов на повседневную работу установки и т. д. Хотя некоторые параметры процесса устанавливаются проектной основой или отделом производства / планирования, другие, как и температура в реакторе, может быть оптимизирована инженером-технологом Penex. Если температуры реактора не регулируются в соответствии с составом сырья и параметрами процесса, октановое число продукта снижается ниже максимально достижимого значения, что представляет собой недостаточную загрузку установки, худшее качество продукта и прямые финансовые потери.

Поскольку реакция изомеризации является равновесной, равновесие изо- и нормальных парафинов будет достигаться на выходе из реактора. Когда это равновесие достигнуто, будет получено максимальное соотношение продуктов или равновесное соотношение продуктов. Любая попытка превысить равновесное соотношение продуктов с идеей производства большего количества изо парафинов в выходящем потоке реактора могут привести только к меньшему выходу изопарафинов и увеличению пропана и меньшему выходу из-за гидрокрекинга.¹ Параметры процесса, при которых равновесие изо- и нормальных парафинов, достигнутое в выходящем потоке реактора, близко к теоретическим значениям, определяются оптимизацией температур реактора. Это равновесие представляет собой максимально достижимое качество продукции Penex.

В основу универсальной системы моделирования HYSYS заложены общие принципы расчетов материально-тепловых балансов технологических схем. Как правило, любое производство состоит из стадий (элементов), на каждой из которых производится определенное воздействие на материальные потоки и превращение энергии. Последовательность стадий обычно описывается с помощью технологической схемы, каждый элемент которой соответствует определенному технологическому процессу (или группе совместно протекающих процессов). Соединения между элементами технологической схемы соответствуют материальным и энергетическим потокам, протекающим в системе. В целом моделирование технологической схемы основано на применении общих принципов термодинамики к отдельным элементам схемы и к системе в целом.

HYSYS включает набор следующих основных подсистем, обеспечивающих решение задачи моделирования химико-технологических процессов:

- набор термодинамических данных по чистым компонентам (база данных) и средства, позволяющие выбирать определенные компоненты для описания качественного состава рабочих смесей;
- средства представления свойств природных углеводородных смесей, главным образом – нефтей и газоконденсатов, в виде, приемлемом для описания качественного состава рабочих смесей, по данным лабораторного анализа;
- различные методы расчета термодинамических свойств, таких как коэффициента фазового равновесия, энтальпии, энтропии, плотности, растворимости газов и твердых веществ в жидкостях и фугитивности паров;
- набор моделей для расчета отдельных элементов технологических схем – процессов;
- средства для формирования технологических схем из отдельных элементов;

-средства для расчета технологических схем, состоящих из большого числа элементов, определенным образом соединенных между собой.

Библиотека программы HYSYS содержит данные по более чем 2500 чистым веществам, что дает возможность использовать программу практически для любых технологических расчетов процессов добычи и переработки углеводородного сырья, нефтехимии и химии. На практике, при решении задач, характерных для газовой и нефтяной промышленности, используются не более 100 компонентов.

В данном учебном пособии рассматривается один из программных продуктов компании AspenTech – Aspen HYSYS, на наш взгляд, очень удобный для технолога.

Программный продукт Aspen HYSYS является лидером на рынке инструментов по моделированию и оптимизации химико-технологических процессов и систем в химической промышленности.

1 Процесс изомеризации

Система DIP-Penex-DIH установки изомеризации легкой нефти НПЗ в Сисаке показана на рисунке 1. Установка производит продукт с самым высоким октановым числом и самый высокий выход продукта по сравнению с другими технологиями UOP для изомеризации легкой нефти³.

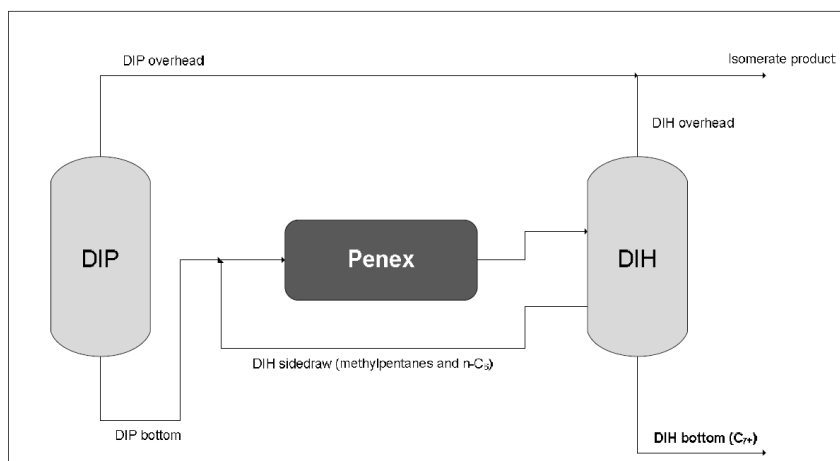


Рис.1. Система UOP DIP-Penex-DIH для производства высокооктановых изомеризатов

Сырье для установки изомеризации представляет собой смесь двух потоков: гидроочищенной легкой нефти, из установки гидроочистки и легкий продукт риформинга из колонны дегептанатора. Изомеризация легкой нефти происходит в секции Пенекс и октановое число увеличивается при превращении линейных углеводородов C₅ / C₆ в разветвленные. Высокооктановые изопентаны отделяются от нормальных парафинов, гексанов и C₇ +. углеводороды в колонке DIP. Реакторы Penex загружены платиновым катализатором на основе, в котором протекают реакции изомеризации. Раздел Пенекс проиллюстрировано на рисунке 2.

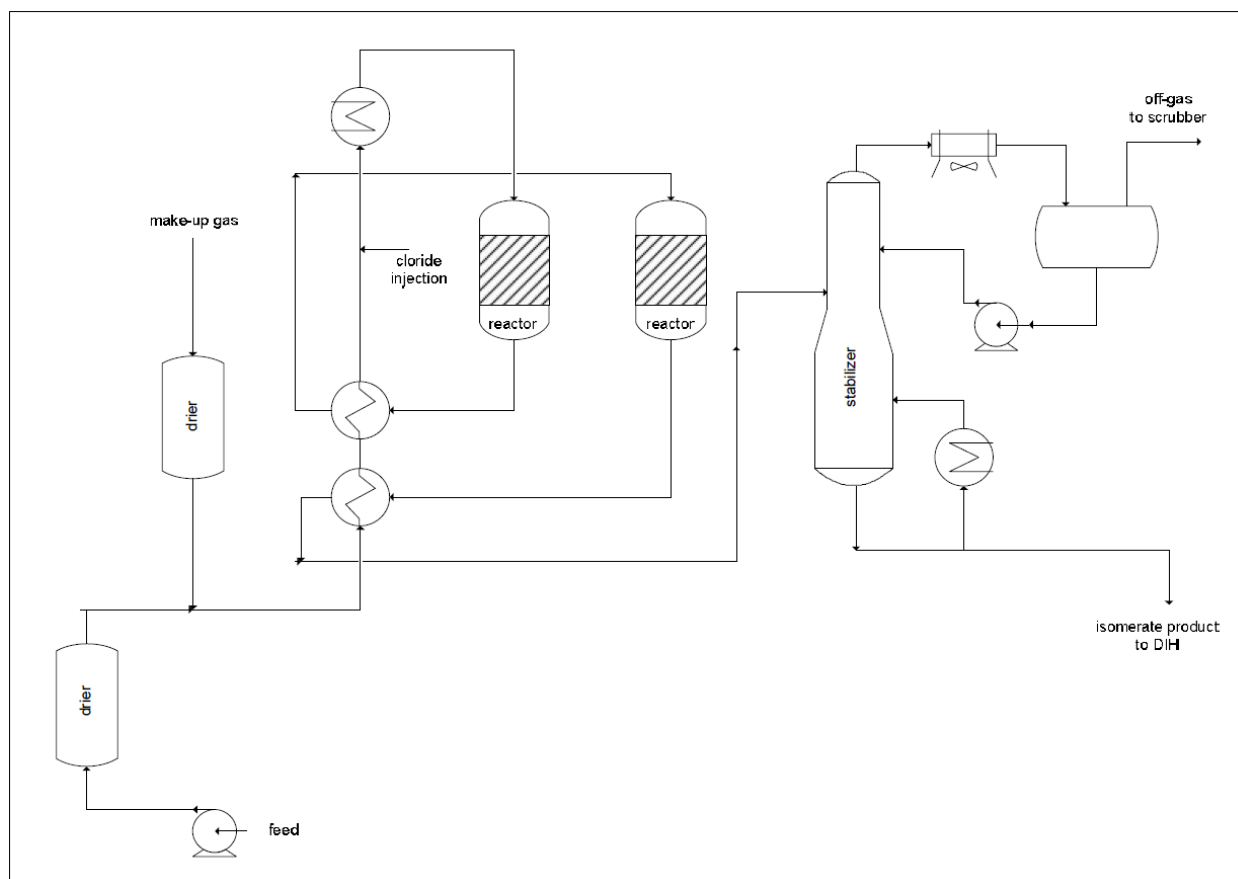


Рис. 2. Упрощенная схема участка Renex легкой нефти.
установка изомеризации

Перед входом комбинированного потока жидких углеводородов и газа, богатого водородом в загрузочный нагреватель и в ведущий / ведомый реакторы оба потока сырья сушатся в осушители жидкости и подпиточного газа. Сушилки для подачи жидкости и газа предназначены для удалить кислородсодержащие соединения, которые навсегда деактивируют катализатор. После Комбинированное сырье нагревается до температур реактора, поступает в опережающий и запаздывающий

Реакторы Renex, работающие последовательно. После подачи сырья / выходящего потока реактора теплообменники и перед нагревателем загрузки, органические хлориды впрыскиваются в чтобы поддерживать кислотную функцию катализатора. После выхода из лаг-реактора поток продукта охлаждается в теплообменниках и затем направляется в стабилизатор для отделение легких углеводородов от жидкого потока. Хлориды очищаются от легких углеводородов в скруббере щелочным раствором. Нижняя часть стабилизатора направляется в колонку DIH, где находятся высокоценные изогексаны и соединения C5 отделяются как верхний продукт, в то время как метилпентаны, н-гексан и часть C6 циклические соединения рециркулируют обратно в ведущий реактор, обеспечивая высокое октановое число продукта. В нижний продукт содержит остатки циклов C6 и углеводороды C7+. В

Продукт изомеризации, изомеризат, который представляет собой смесь головного погона DIP и DIN, в основном состоит из высокооктановых соединений, таких как изопентан, 2,2-диметилбутан и 2,3-диметилбутан.

2 Описание моделирования модели технологической схемы установки в Aspen HYSYS

Моделирование реакторного блока установки изомеризации проводилось нами в профильном программном обеспечении Aspen HYSYS при помощи термодинамического пакета Peng-Robinson.

В модели задавался состав исходной газовой смеси, представленный в рис. 6.

2.1 Этапы моделирования технологической схемы установки в Aspen HYSYS

2.1.1 Задание перечня компонентов и выбор метода расчета свойств смесей

При запуске программы открывается окно главного меню системы HYSYS, в котором необходимо выбрать «New» (рисунок 3).

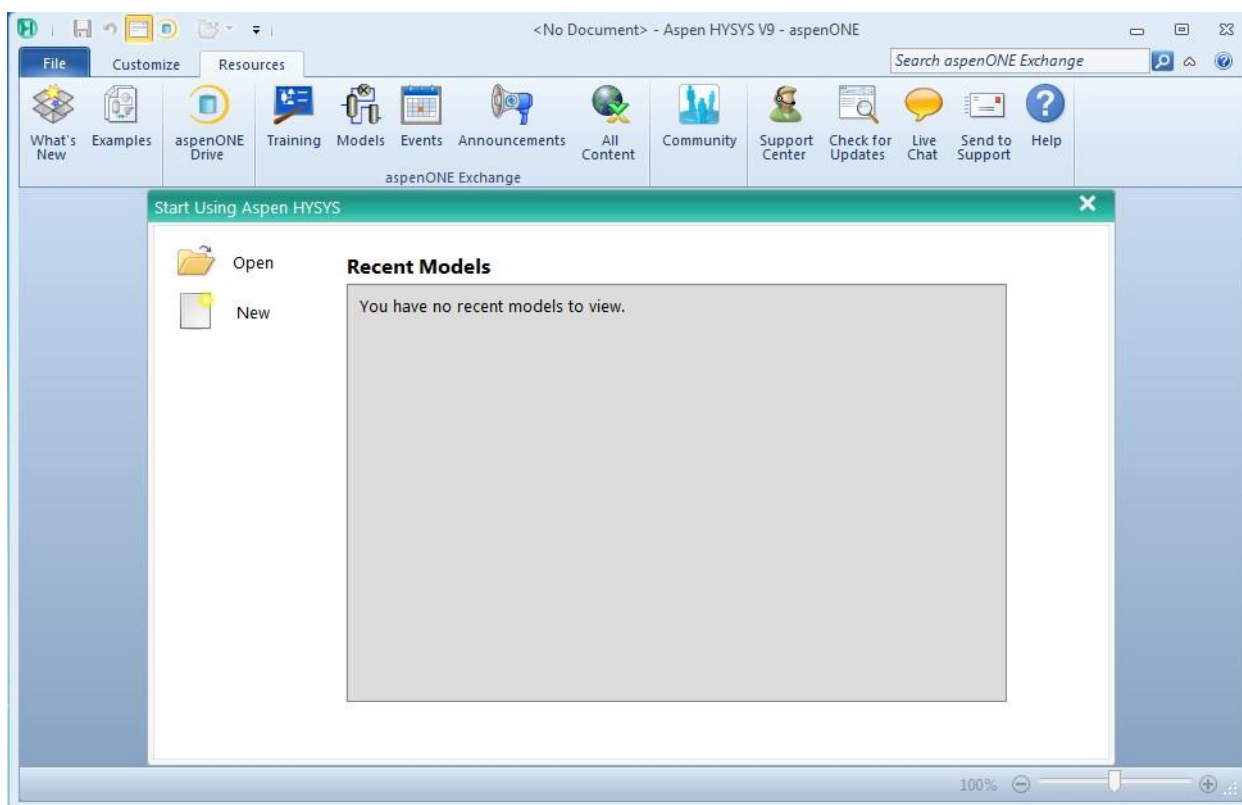


Рис. 3. Окно главного меню системы HYSYS: создание новой Задачи

В открывшемся окне (рисунок 4) выберите пункт «**Components Lists**» и нажмите на кнопку «**Add**» для создания перечня выбранных компонентов (он первоначально пуст и по умолчанию называется «**Component List-1**»), откроется окно «**Component List-1**» (рисунок 5).

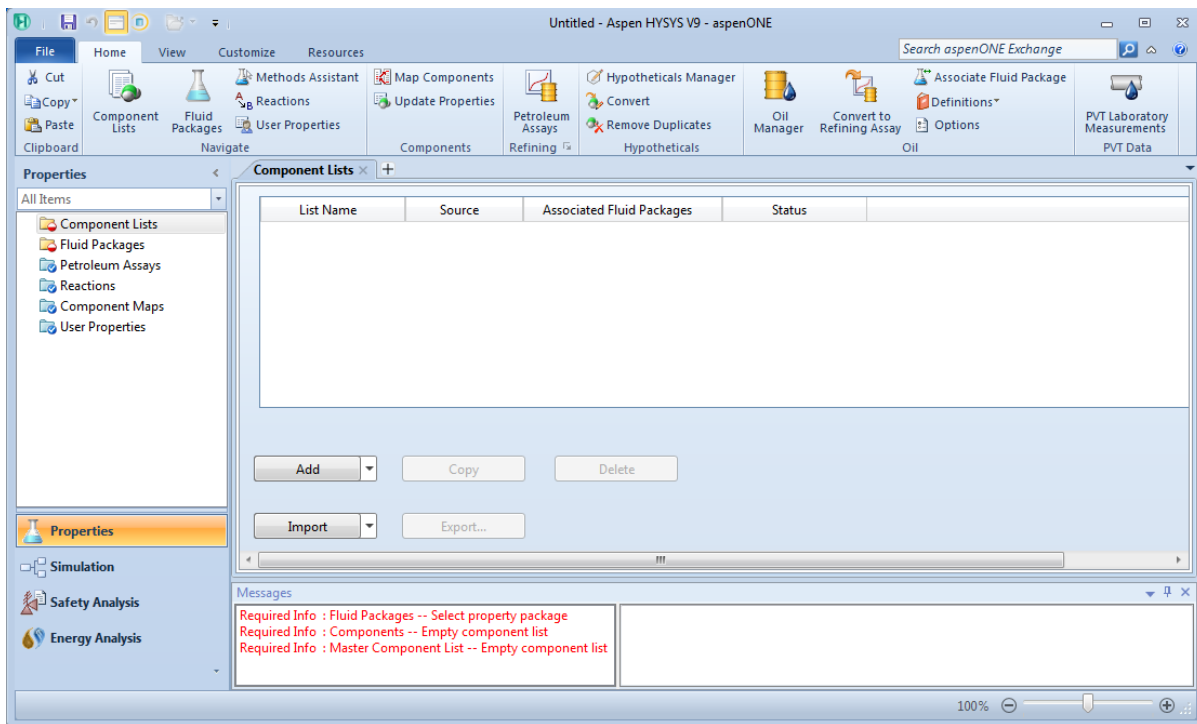


Рис. 4. Окно компонентов

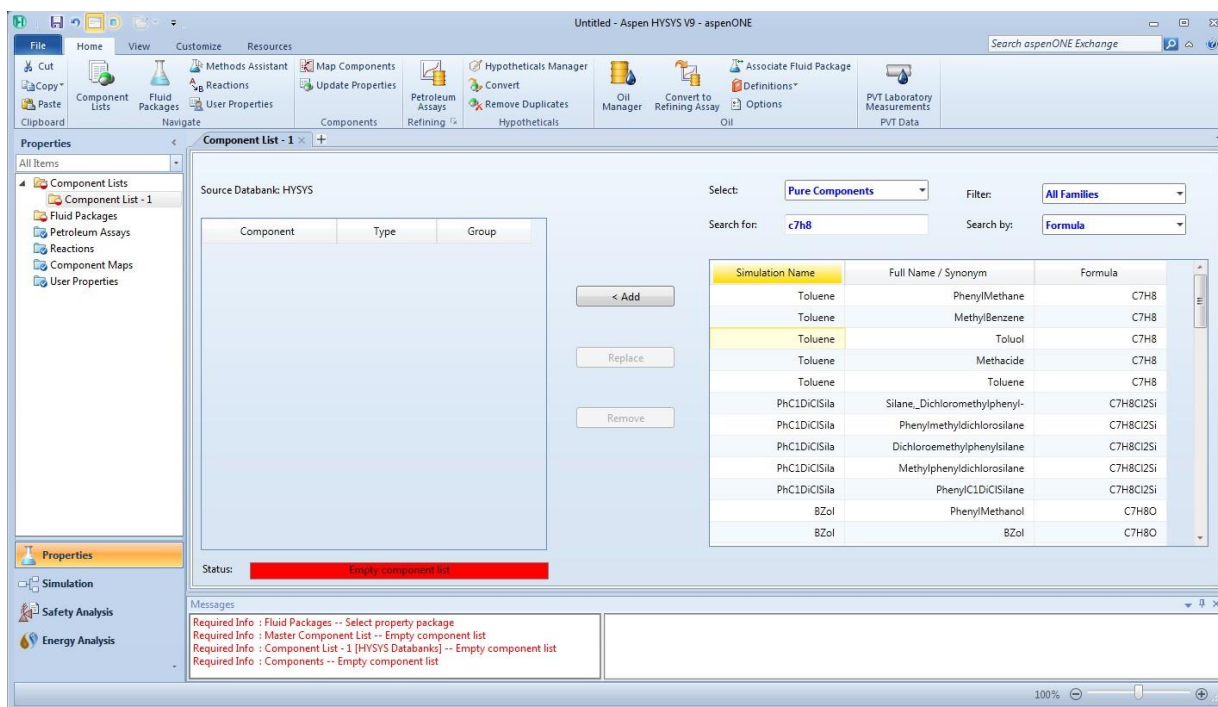


Рис. 5. Окно списка компонентов: редактирование перечня
Компонентов

В правой части этого окна содержится список имеющихся библиотечных компонентов системы HYSYS. Найдите в библиотечном списке метан (CH_4) (либо ваш первый компонент из состава), либо просматривая список, либо, что гораздо проще, осуществив поиск по названию или формуле компонента. Выберите в пункте поиск по «Search by» поиск по формуле «Formula» и введите

формулу метан (CH₄) а в поле «Search for» (рисунок 6); отметьте курсором в библиотечном списке метан и нажмите кнопку «Add», при этом компонент будет перемещен из библиотеки в левый раздел выбранных компонентов. Аналогичным образом поступите для других компонентов (рисунок 6).

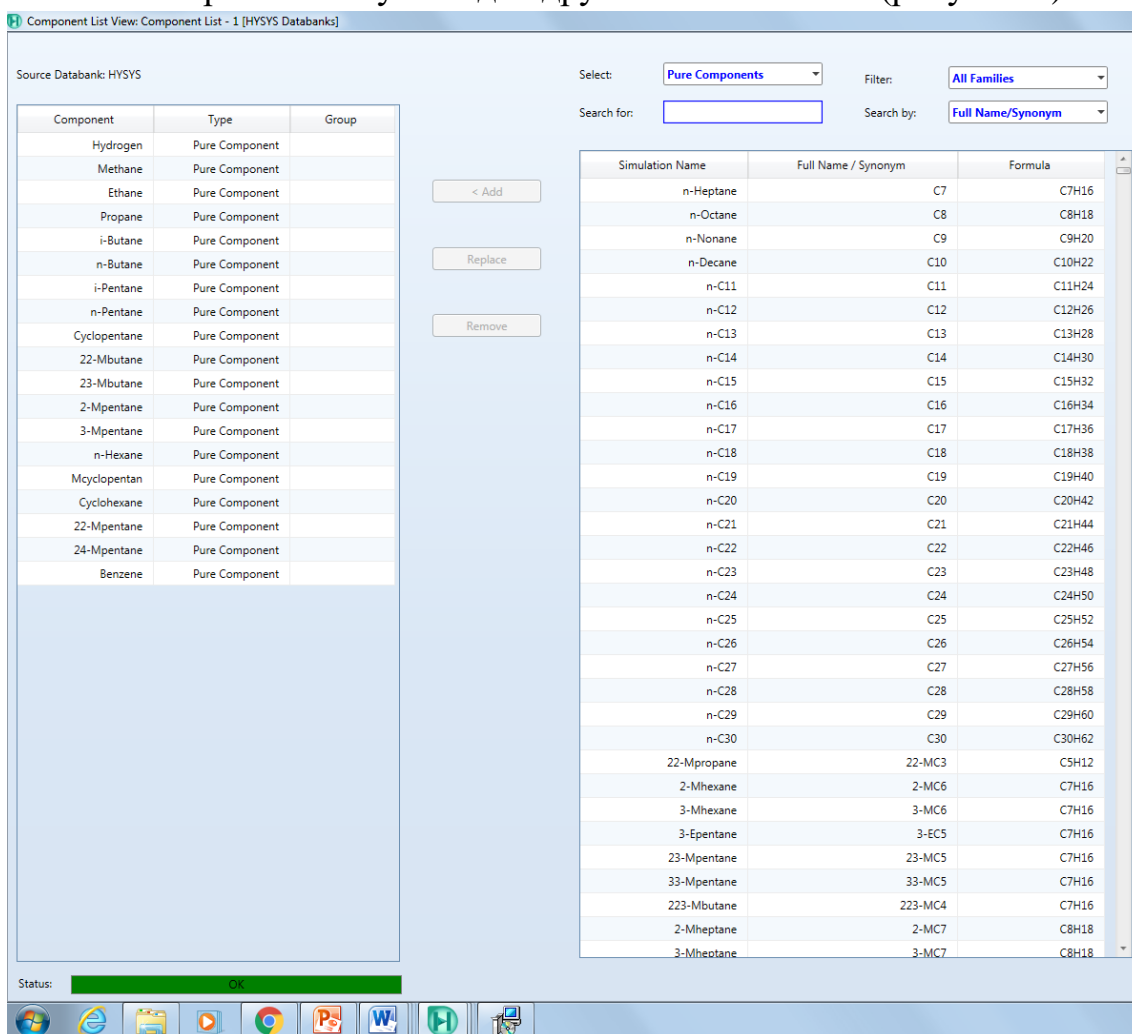


Рис. 6. Окно выбранных компонентов

Когда Ваш перечень будет готов, перейдите на закладку *пакетов свойств* «**Fluid Packages**» (рисунок 7) и нажмите кнопку *добавить* «**Add**». Это действие выполняется для того, чтобы добавить пакет свойств, с помощью которого будут рассчитываться свойства смесевых композиций выбранных компонентов.

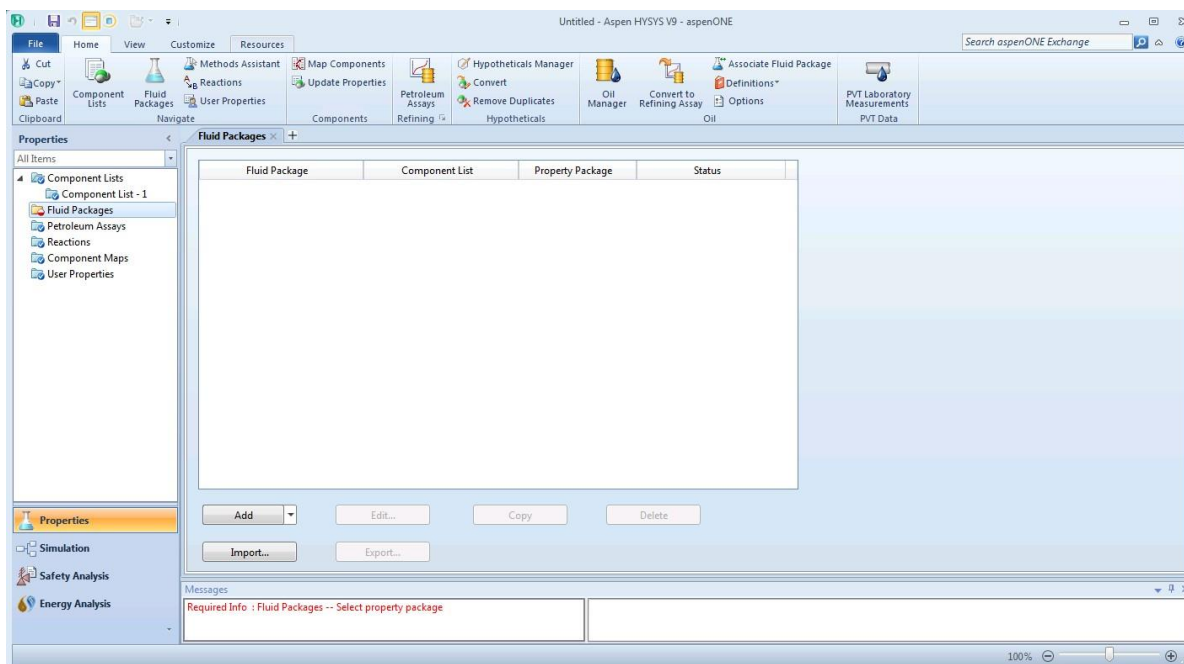


Рис. 7. Окно добавления пакета свойств

В открывшемся окне пакета свойств выберите один из термодинамических пакетов, имеющих в HYSYS. Для нашей задачи выберите метод расчета Peng-Robinson (рисунок 8).

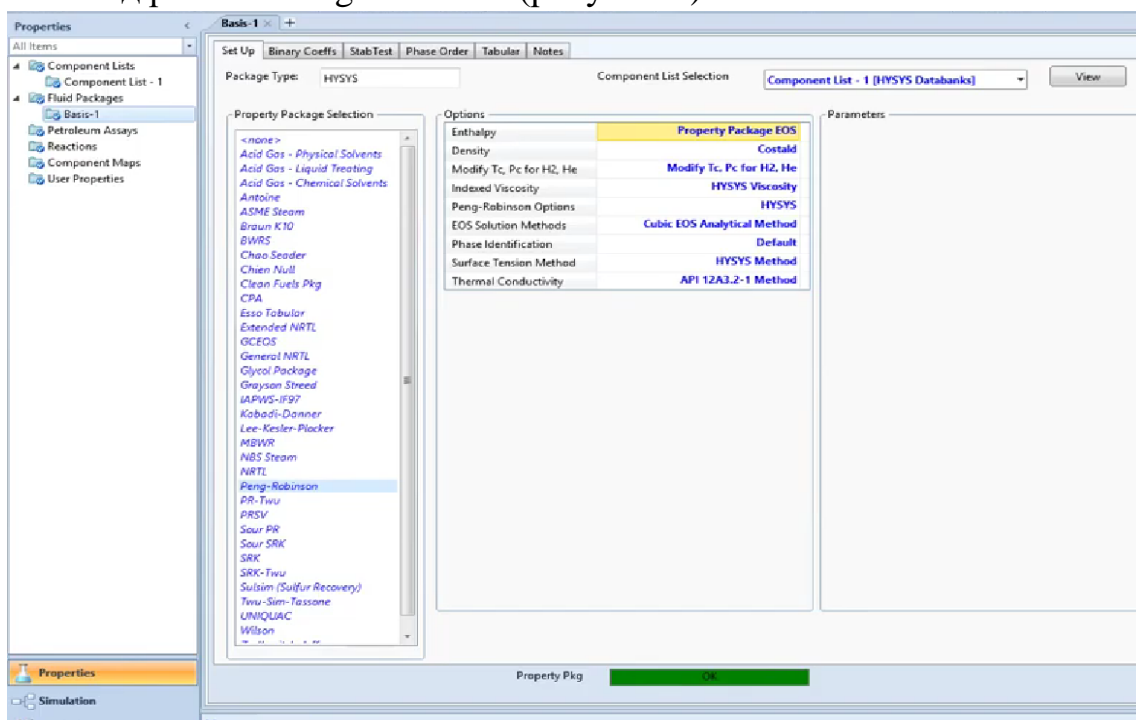


Рис. 8. Окно выбора пакета свойств

После выбора пакета свойств, переходим к моделированию.

2.2 Задание перечня аппаратов и схемы их коммутации

Каждый объект технологической схемы имеет цветовую строку состояния, которая находится в нижней части формы объекта.

Цветовые индикаторы для объектов технологической схемы:

Красный – у объекта отсутствуют основные параметры или объект содержит ошибки;

Жёлтый – все соединения имеются, но оператор определен не полностью или содержит предупреждения;

Зелёный – этот оператор решён без ошибок.

Перейдите на закладку моделирование «Simulation». Одновременно с графическим планшетом (первоначально он пуст) на экране монитора появится окно объектов «Palette» со схематическими изображениями различных аппаратов химической технологии, снабженными всплывающими подсказками (рисунок 9).

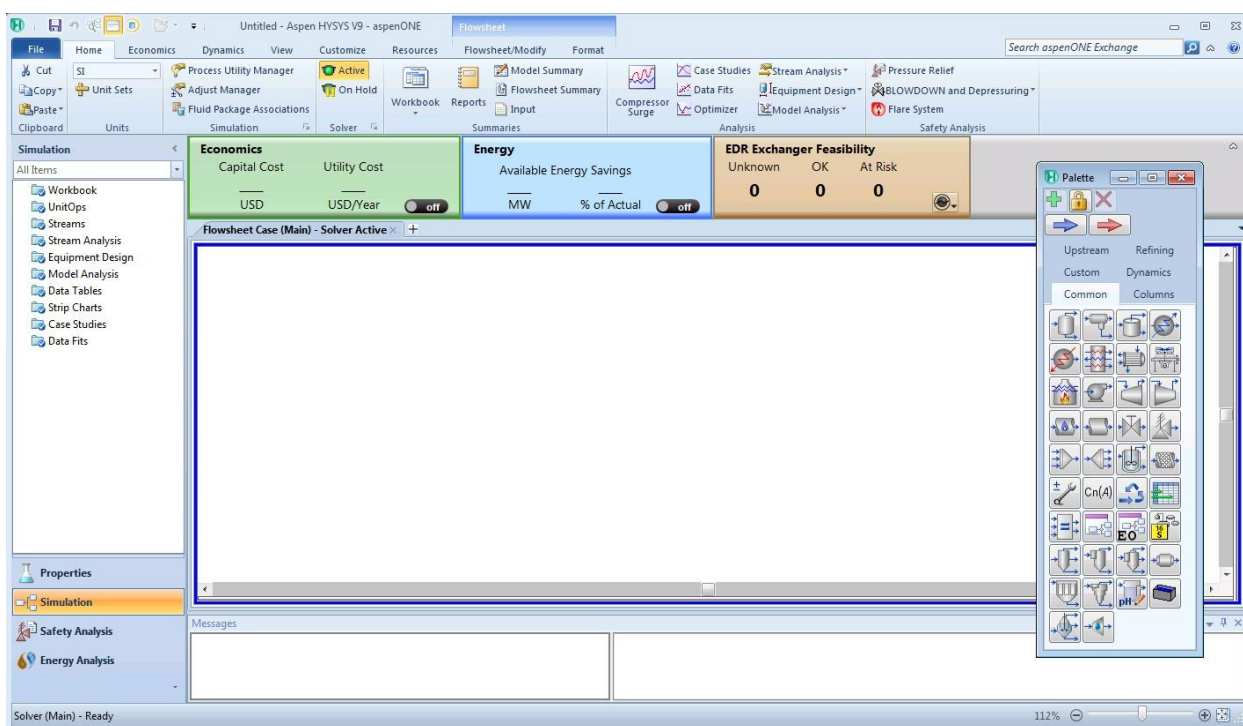


Рис. 10. Окно моделирования системы HYSYS и окно объектов «Palette»

В процессе дальнейшей работы это окно может исчезнуть из поля Вашего зрения вследствие перекрытия другими окнами; для его повторной активизации достаточно открыть вкладку главного меню «**Flowsheet/Modify**» в списке нажать мышью кнопку «**Models and Streams**» (рисунок 11).

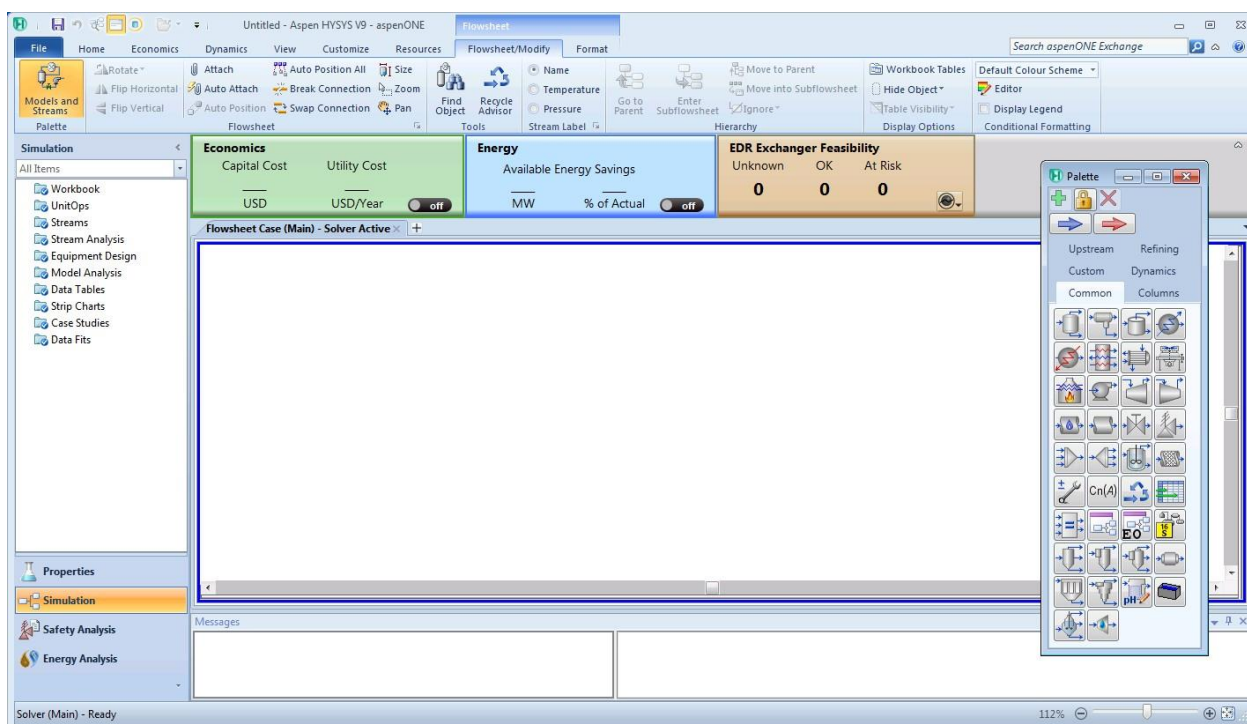


Рис. 11. Фрагмент главного меню: активизация «**Palette**»

Чтобы при моделировании расчет происходил автоматически необходимо, чтобы был включен режим **Active**. При необходимости приостановить расчеты выбирается режим **On Hold** (рисунок 12).

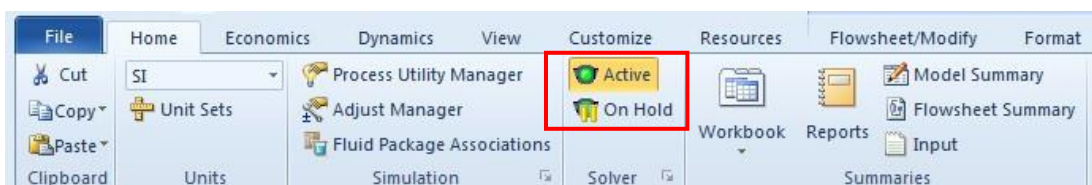


Рис. 12. Фрагмент главного меню: режим автоматического расчета

2.2.1 Добавление материальных потоков в схему установки

В HYSYS имеется два типа потоков: материальный и энергетический. Материальный поток имеет состав и такие параметры как температуру, давление и расход. Энергетический поток имеет только один параметр – теплосодержание.

Имеется несколько способов задания материальных потоков в HYSYS:

Вы можете включать и выключать режим отображения на экране Кассы объектов, нажимая на клавишу <F4> или выбирая пункт Открыть/ Закрывать кассу объектов в меню схема.

Меню	Схема, добавить потоки горячая клавиша F11
Рабочая тетрадь	Задайте имя потока в поле **New** на закладке Материальные потоки
Касса объектов	Дважды щелкните курсором мыши по значку материального потока

2.3 Задание состава потока

Выбирайте поток из Model Palette – Streams, и задавайте параметры и состав (рисунок 13, 14).

The screenshot shows the 'Component List View' window in HYSYS. The window title is 'Component List View: Component List - 1 [HYSYS Databanks]'. The source database is 'HYSYS'. The 'Select' dropdown is set to 'Pure Components', the 'Filter' is 'All Families', and the 'Search by' dropdown is 'Full Name/Synonym'. The 'Search for' field is empty. The main area contains two tables and control buttons.

Component	Type	Group
Hydrogen	Pure Component	
Methane	Pure Component	
Ethane	Pure Component	
Propane	Pure Component	
i-Butane	Pure Component	
n-Butane	Pure Component	
i-Pentane	Pure Component	
n-Pentane	Pure Component	
Cyclopentane	Pure Component	
22-Mbutane	Pure Component	
23-Mbutane	Pure Component	
2-Mpentane	Pure Component	
3-Mpentane	Pure Component	
n-Hexane	Pure Component	
Mycyclopentan	Pure Component	
Cyclohexane	Pure Component	
22-Mpentane	Pure Component	
24-Mpentane	Pure Component	
Benzene	Pure Component	

Simulation Name	Full Name / Synonym	Formula
n-Heptane	C7	C7H16
n-Octane	C8	C8H18
n-Nonane	C9	C9H20
n-Decane	C10	C10H22
n-C11	C11	C11H24
n-C12	C12	C12H26
n-C13	C13	C13H28
n-C14	C14	C14H30
n-C15	C15	C15H32
n-C16	C16	C16H34
n-C17	C17	C17H36
n-C18	C18	C18H38
n-C19	C19	C19H40
n-C20	C20	C20H42
n-C21	C21	C21H44
n-C22	C22	C22H46
n-C23	C23	C23H48
n-C24	C24	C24H50
n-C25	C25	C25H52
n-C26	C26	C26H54
n-C27	C27	C27H56
n-C28	C28	C28H58
n-C29	C29	C29H60
n-C30	C30	C30H62
22-Mpropane	22-MC3	C5H12
2-Mhexane	2-MC6	C7H16
3-Mhexane	3-MC6	C7H16
3-Epentane	3-EC5	C7H16
23-Mpentane	23-MC5	C7H16
33-Mpentane	33-MC5	C7H16
223-Mbutane	223-MC4	C7H16
2-Mheptane	2-MC7	C8H18
3-Mheptane	3-MC7	C8H18

Control buttons: < Add, Replace, Remove.

Status: OK

Рис. 13. Окно выбранных компонентов

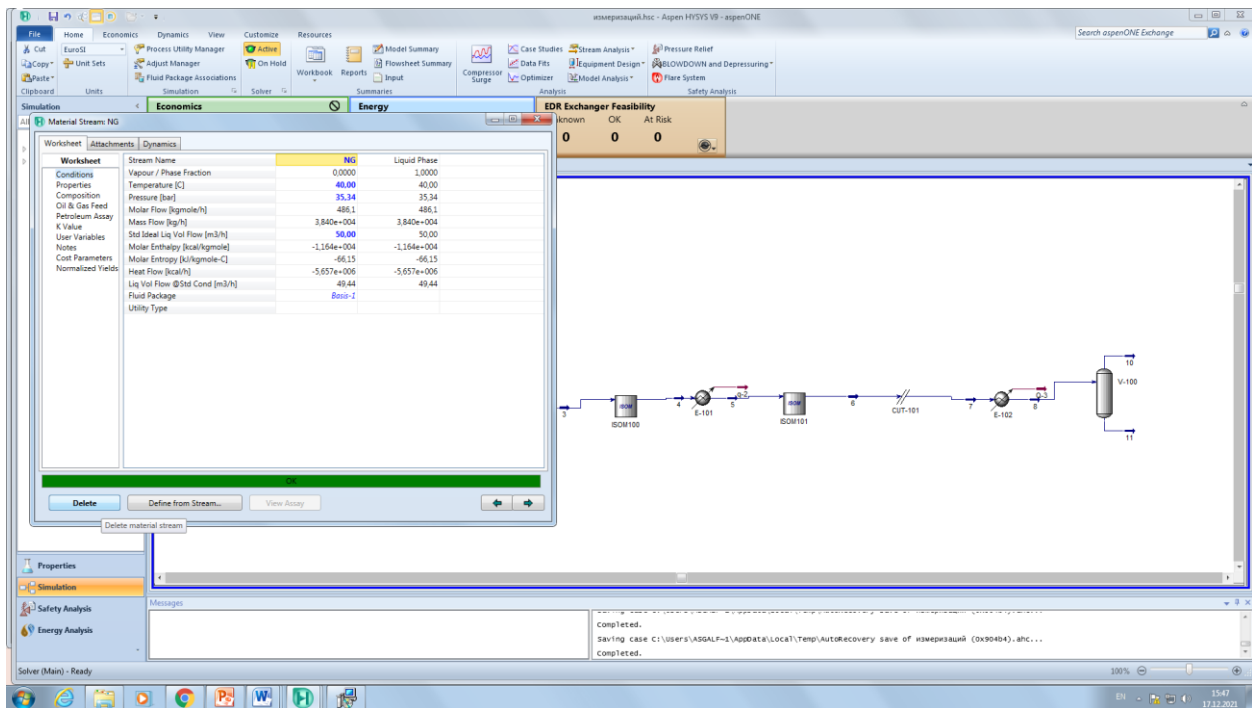


Рис. 14. Исходные данные для моделирования (Temperature, pressure, mass flow).

Теперь также выберите поток для ВСГ и задавайте параметры и состав (рисунок 15, 16).

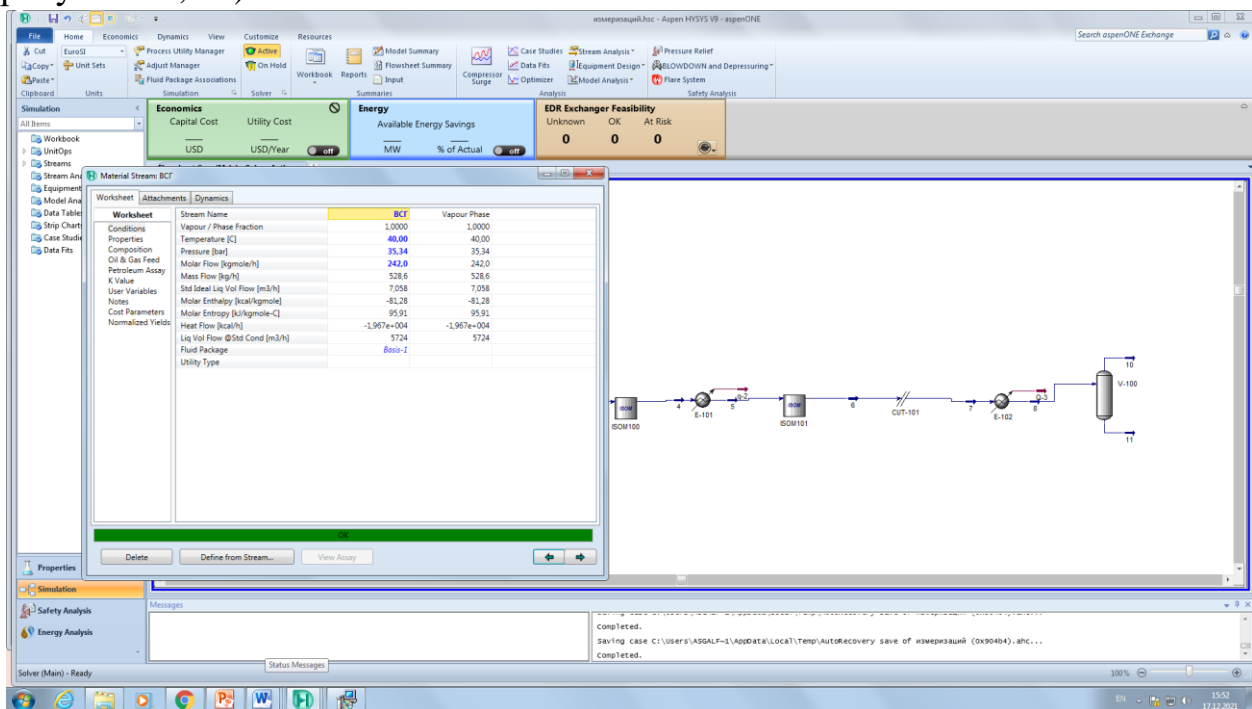


Рис. 15. Исходные данные для ВСГ (Temperature, pressure, mass flow).

	Mass Flows	Vapour Phase
Hydrogen	482.9932	482.9932
Conditions	78.0991	31.0991
Properties		
Composition	14.5538	14.5538
Oil & Gas Feed	0.0000	0.0000
Propane	0.0000	0.0000
i-Butane	0.0000	0.0000
n-Butane	0.0000	0.0000
i-Pentane	0.0000	0.0000
n-Pentane	0.0000	0.0000
Cyclopentane	0.0000	0.0000
2,2-Methylbutane	0.0000	0.0000
2,3-Methylbutane	0.0000	0.0000
2-Methylpentane	0.0000	0.0000
3-Methylpentane	0.0000	0.0000
n-Hexane	0.0000	0.0000
Methylcyclopentane	0.0000	0.0000
Cyclohexane	0.0000	0.0000
2,2-Methylpentane	0.0000	0.0000
2,4-Methylpentane	0.0000	0.0000
Benzene	0.0000	0.0000

Total: 528.60617 kg/h

Рис. 16. Состав ВСГ

После этого поставьте на линию поток газ и ВСГ нагреватель (рисунок 17), и задайте температуру во вкладке параметр нагреватель 34,37 °С.

Worksheet	1	2	Q-1
Conditions	0.3277	0.4565	<empty>
Vapour			<empty>
Temperature [C]	37.93	156.0	<empty>
Pressure [bar]	35.34	34.34	<empty>
Composition			<empty>
PF Specs			<empty>
Molar Flow [kgmole/h]	728.1	728.1	<empty>
Mass Flow [kg/h]	3.892e+004	3.892e+004	<empty>
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	37.06	37.06	<empty>
Molar Enthalpy [kcal/kgmole]	-7.97	-38.5	<empty>
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	-12.11	32.79	<empty>
Heat Flow [kcal/h]	-5.677e+006	-2.792e+006	2.884e+006

Рис.17. Параметр нагреватель газа

Далее устанавливаете переход (Stream Cutter) поток и реактор изомеризации (рис. 18).

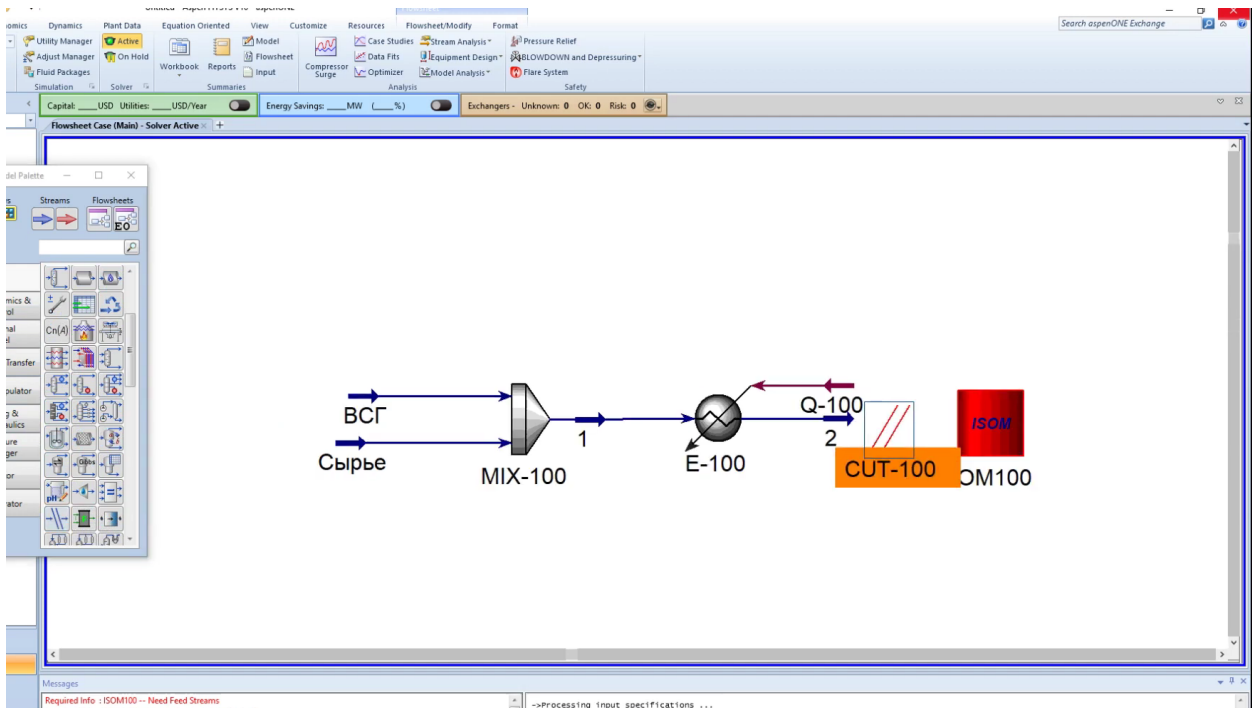


Рисунок 18. переход (Stream Cutter) поток и реактор изомеризации
 Далее задайте механический параметр как на рисунке 19.

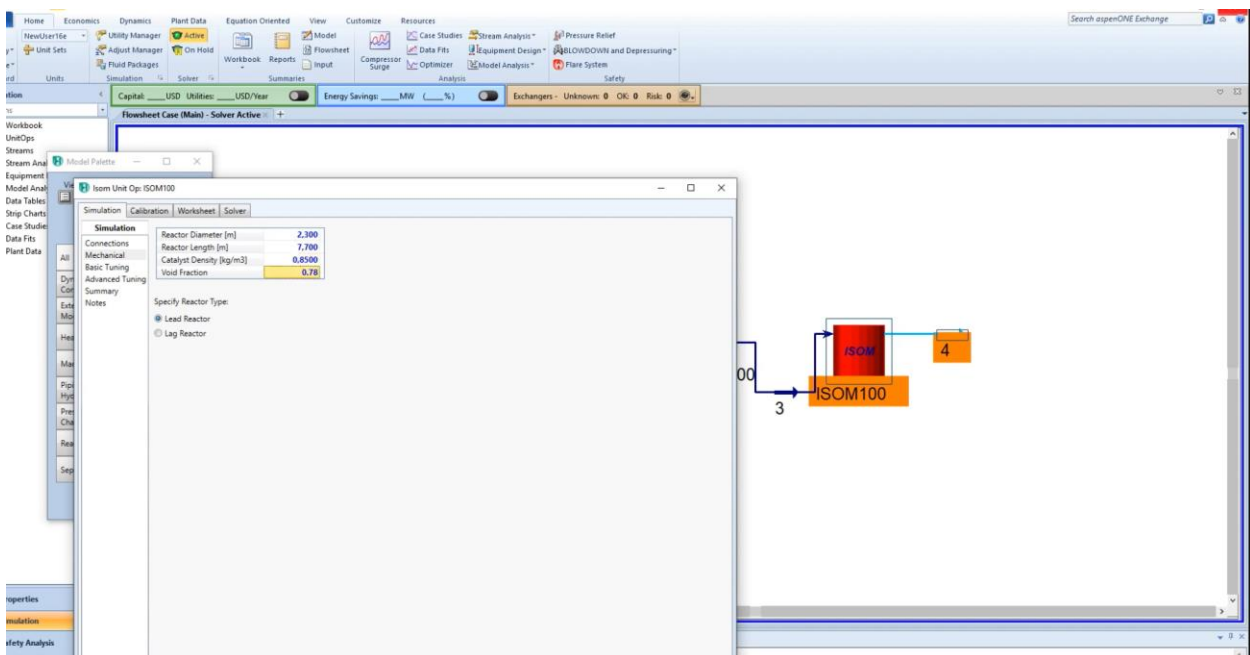


Рис. 19. Механический параметр реактора изомеризации

Далее переходите во вкладку Calibration (рисунок 20) и нажимаете на вклад Pull Data from Simulation (для переноса данных реактора).

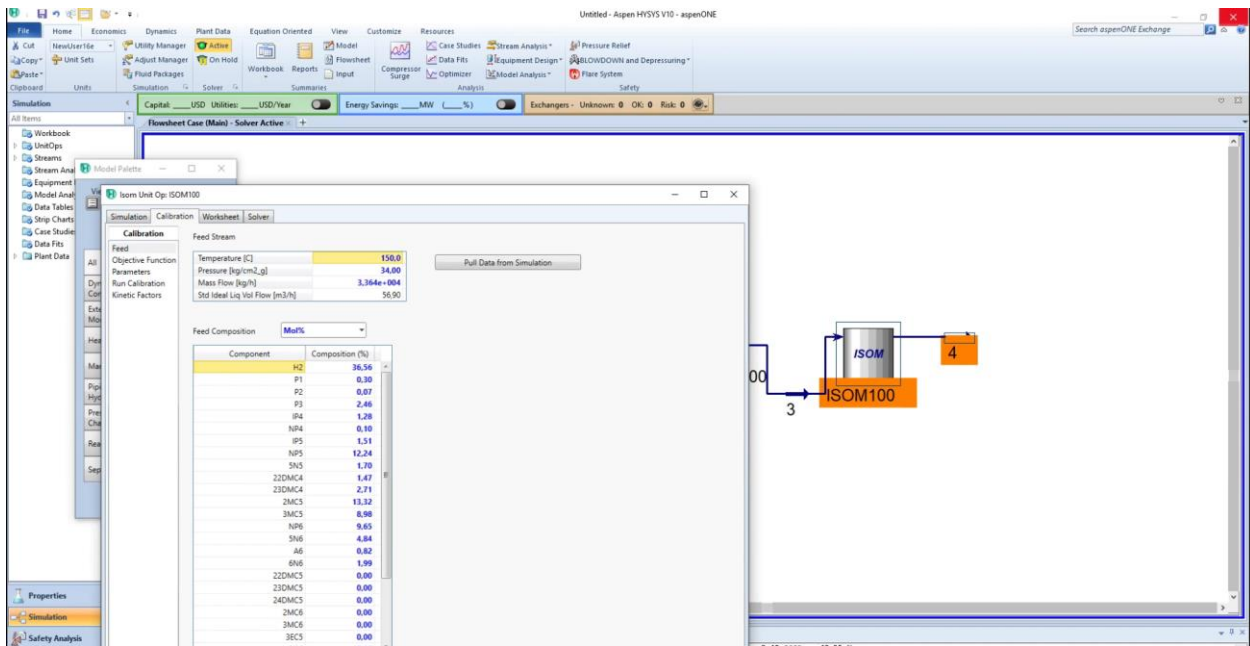


Рисунок 20. Вкладка Calibration

Далее переходите на вкладку Objective Function (рисунок 21) и копируете данные Sigma и переносите их в вкладку Plant (рисунок 21).

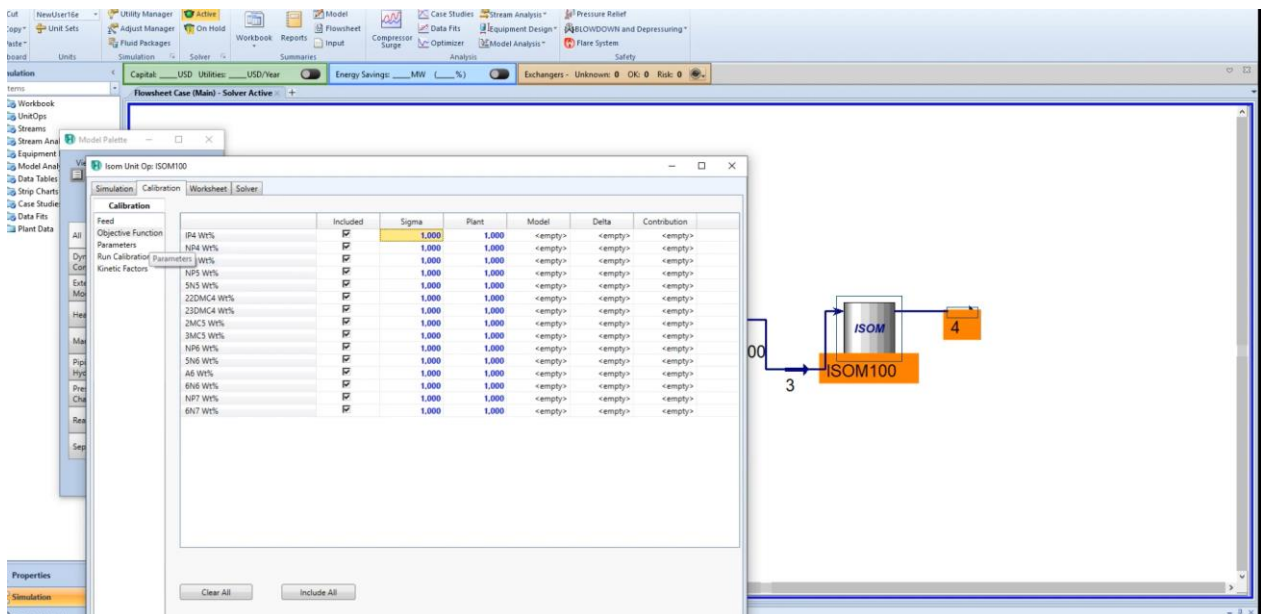


Рис. 21. Вкладка Objective Function

Далее переходите на вкладку параметры и добавляете нижние и верхние границы (рисунок 22).

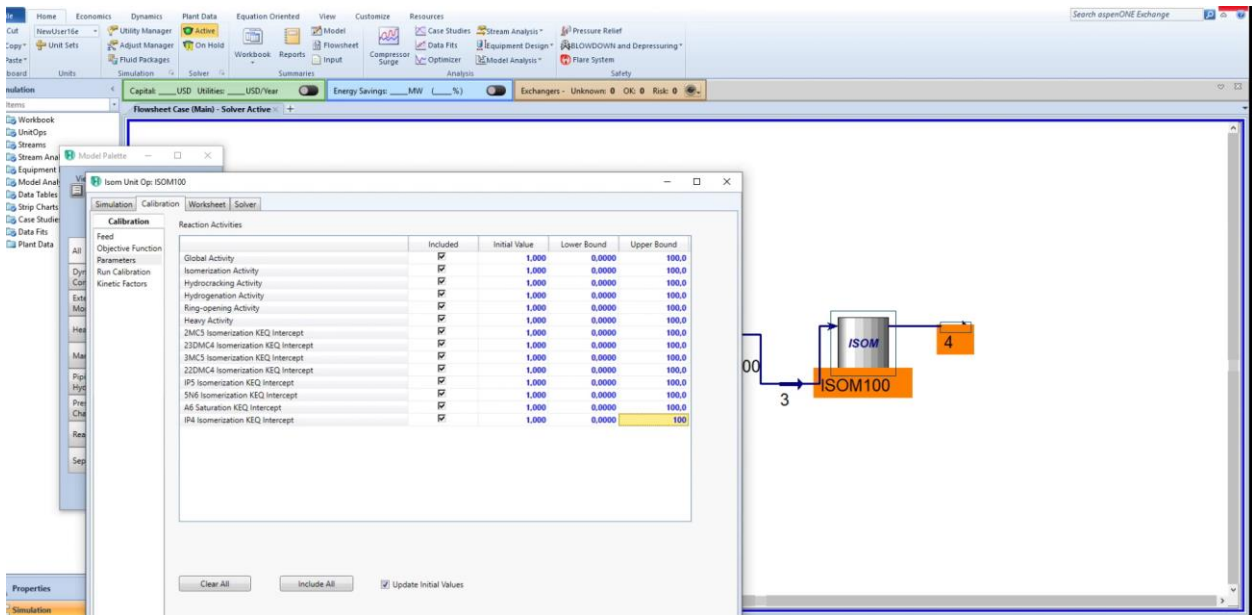


Рис. 22. Вкладка параметры

Далее переходите на вкладку Run Calibration и нажимаете Initialize Calibration и после этого нажимаете на вкладку запустить калибровку, далее нажимаете на вкладку Transfer factors Simulation (рисунок 23).

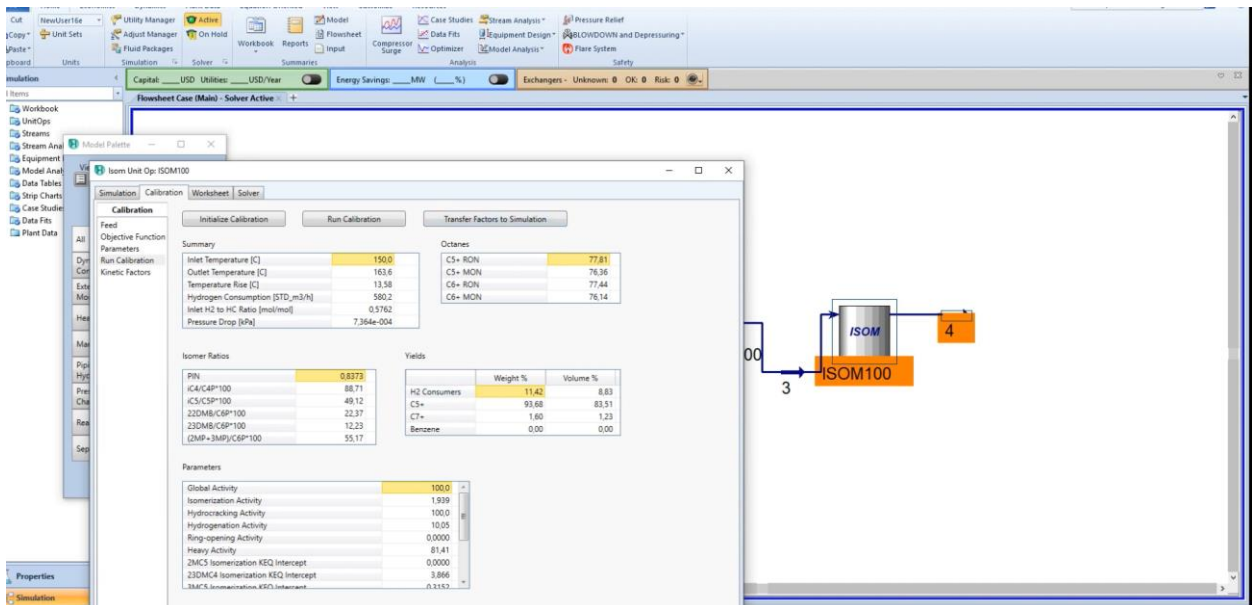


Рис. 23. Вкладка Run Calibration

Далее устанавливаете холодильник и задаете необходимое давление и температуру (рисунок 24)

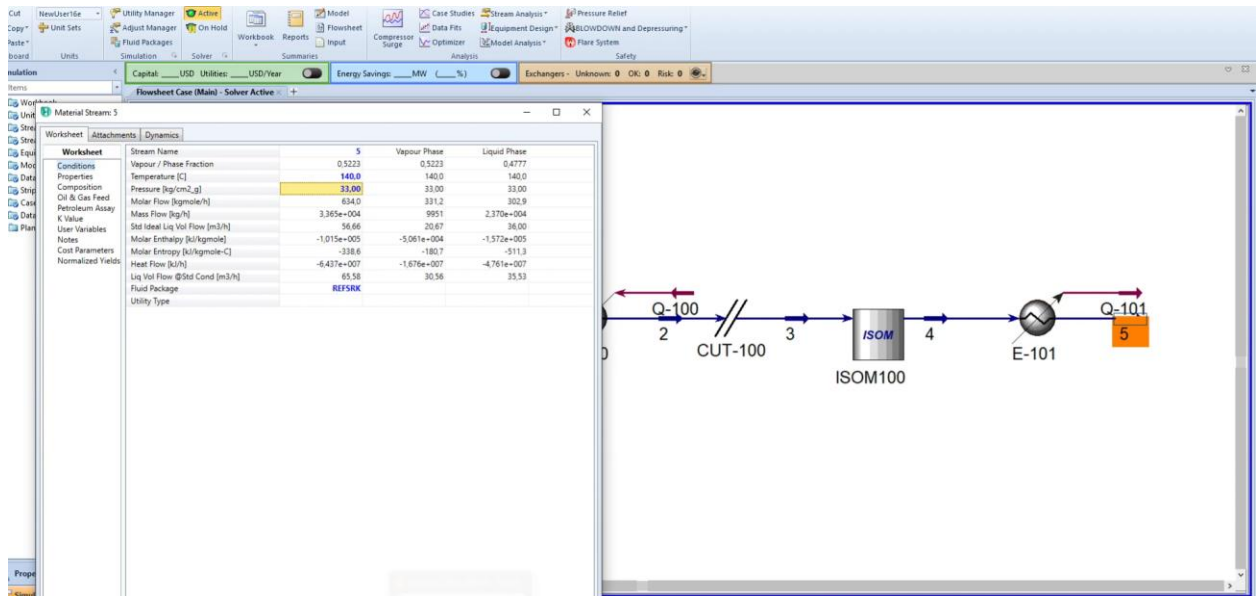


Рис. 24. Параметры холодильника

Далее добавляете второй реактор и повторите те самые шаги, как было с первым реактором. Далее добавляете приход (Stream Cutter) поток (рисунок 25).

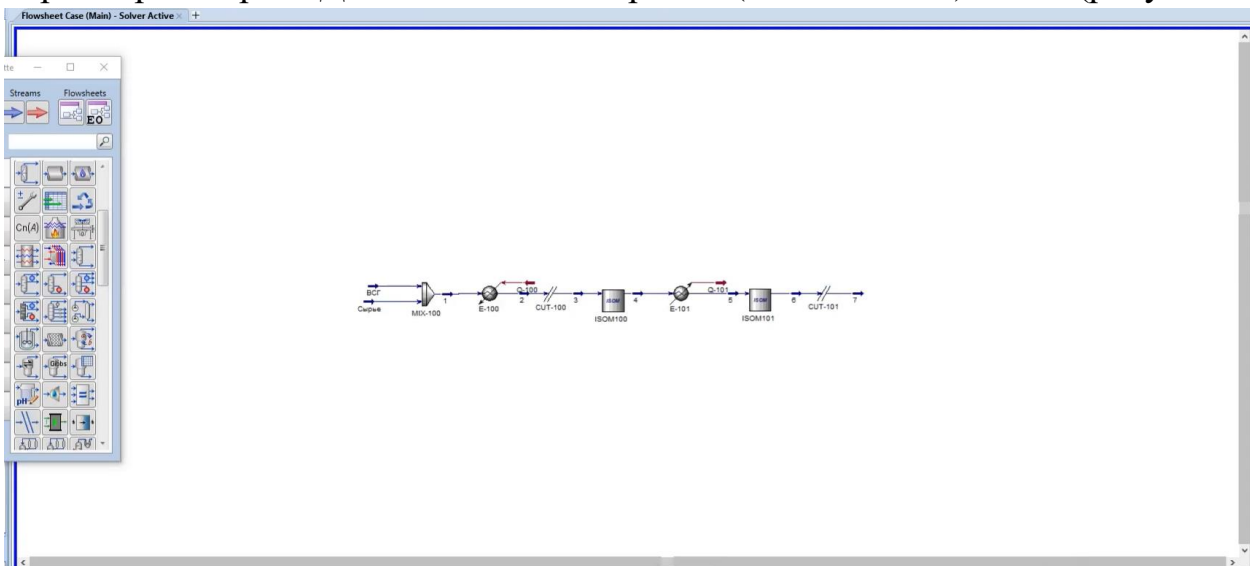


Рис. 25. Приход (Stream Cutter) поток

Далее устанавливайте холодильник и задайте параметры (рисунок 26).

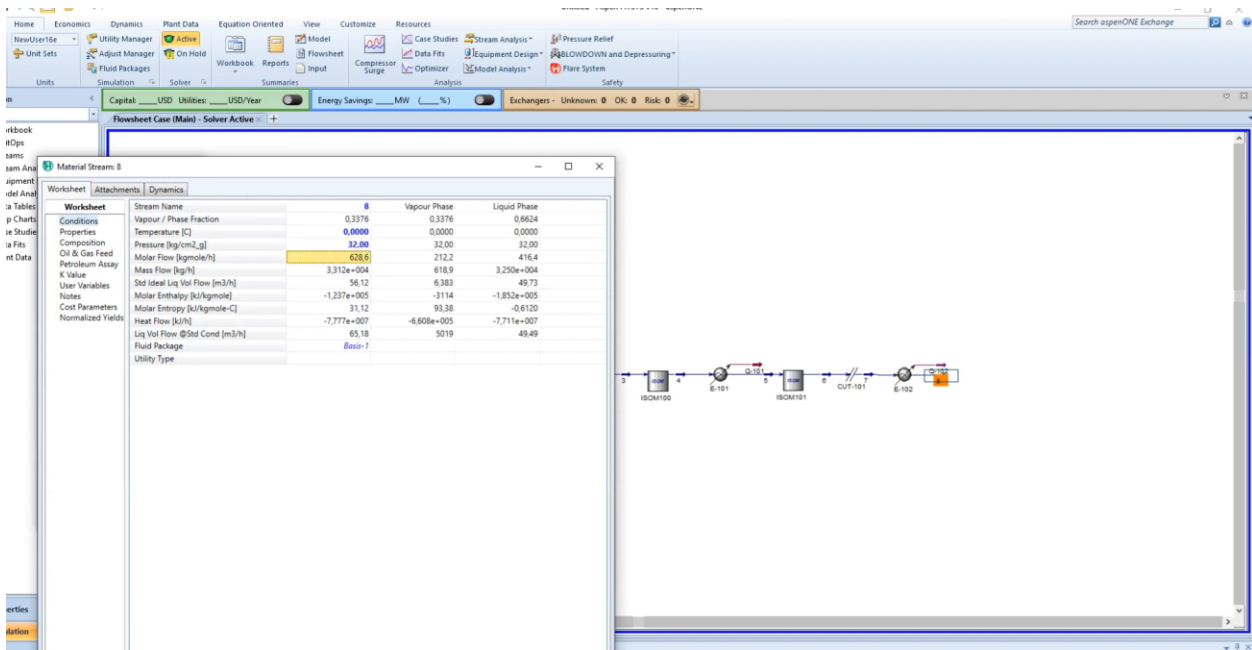


Рис. 26. Параметры холодильника

Далее добавляете сепаратор, чтобы показать состав конечного продукта (рисунок 27)

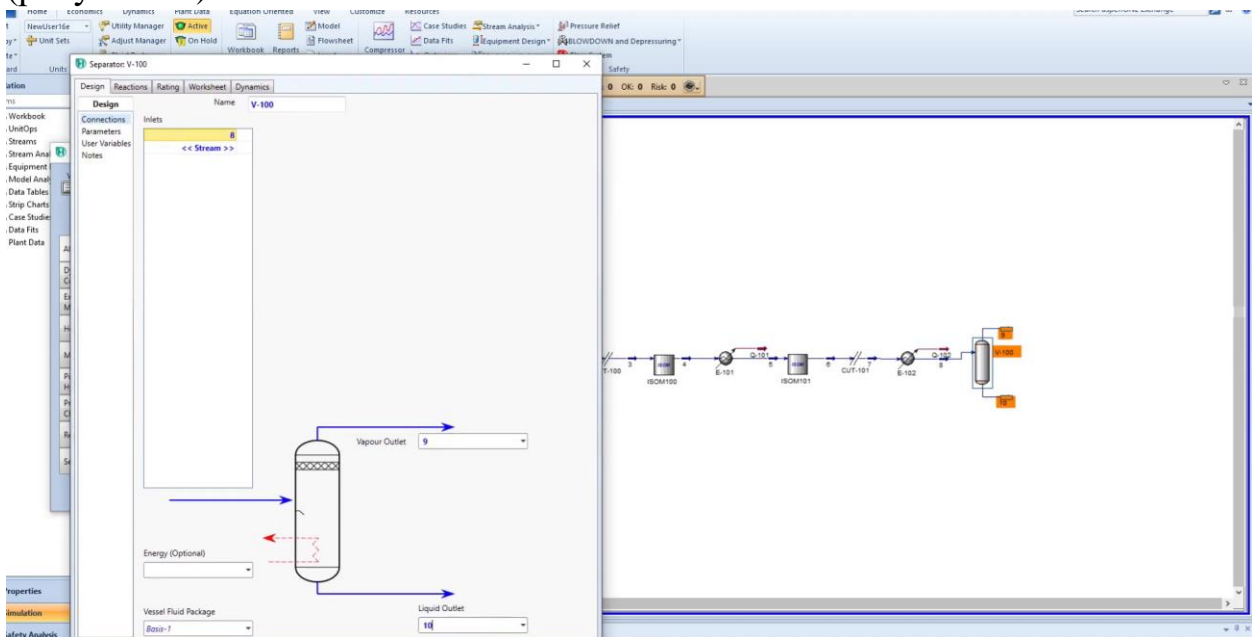


Рис. 27. Сепаратор

На этом этапе завершено моделирование реактора блока установки изомеризации.

Теперь можно сравнить приход сырья (газ) с расходом полученных продуктов на 10 потока (рисунок 28).

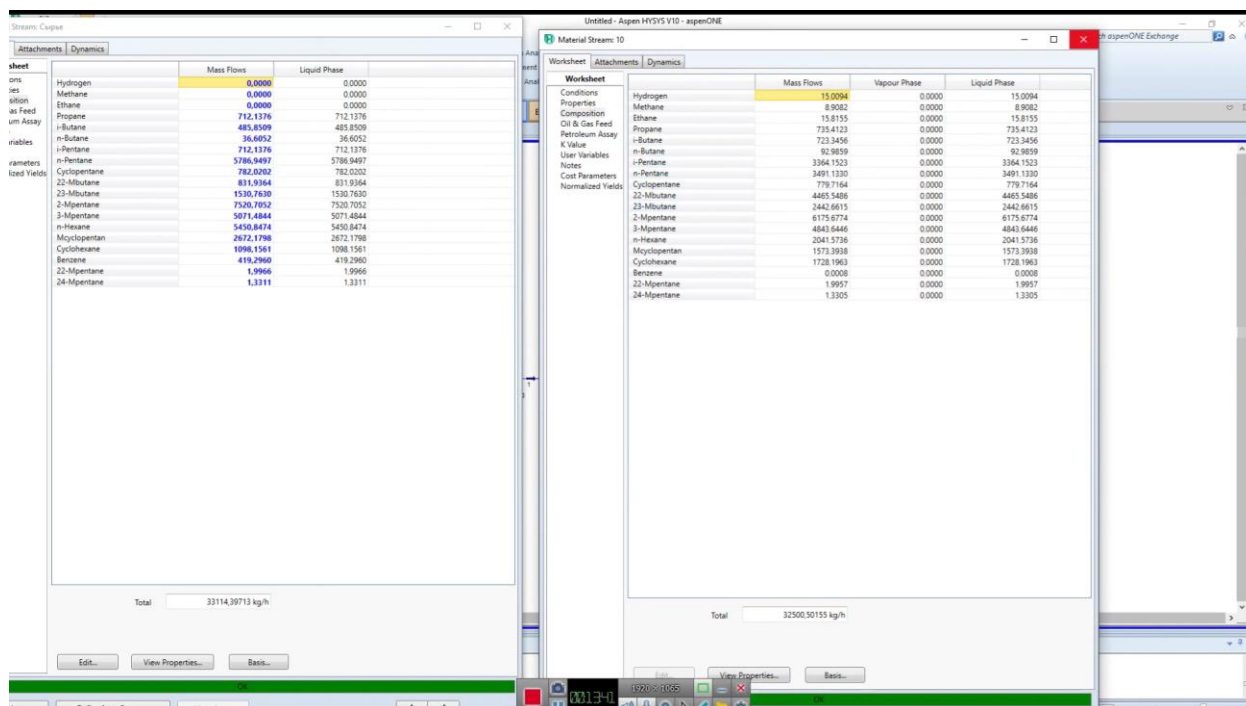


Рис. 28. Сравнение полученных результатов моделирования

Вывод

Исходя из полученных результатов моделирования видно, что количество n-пентана, которая поступает в приходе 5786,950 кг/ч и в расходе составила 3491,133 кг/ч. Повышается количество i-пентана 3364,152 кг/ч (рисунок 25). Проведенные результаты показывают, моделирование схемы и расчеты выполнены в полном объеме, установка изомеризации рабочая.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Процесс изомеризации является одним из самых рентабельных способов получения высокооктановых компонентов бензинов с улучшенными экологическими свойствами. Актуальность установок изомеризации также возросла с введением новых сверхжестких ограничений на экологические свойства автомобильных бензинов, включая ограничение по фракционному составу, содержанию ароматических соединений и бензола. Установки изомеризации позволяют получить топливо с характеристиками, отвечающими жестким стандартам Евро-4 и Евро-5. Интенсивное наращивание мощностей процесса изомеризации осуществляется за счет реконструкции существующих и строительства новых установок. Одновременно проводятся модернизация и интенсификация действующих установок изомеризации под процессы с рециркуляцией не превращённых нормальных парафинов. Сырьём изомеризации являются легкие бензиновые фракции с концом кипения от 62 °С до 85 °С. Повышение октанового числа достигается за счёт увеличения доли изопарафинов. Процесс осуществляется, как правило, в одном или двух реакторах при температуре, в зависимости от применяемой технологии, от 110 до 450 °С и давлении до 35 атм.

Литература

1. Краснобородько, Д.А. Моделирование экстрактивной ректификации с помощью информационно-моделирующей программы Aspen Hysys.: учеб. пособие / Д.А. Краснобородько, Р.Ю. Кулишенко, В.А. Холоднов. СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2018.-62 с.
2. Будник В.А. Методическое пособие по программе подготовки студентов технологических дисциплин. Работа в среде Hysys. Салават: 2010. - 28 с.
3. Ana Vuković. Reactor temperature optimization of the light naphtha isomerization unit // goriva i maziva. 2013. No 52(3). С.195-206.
4. Потапов И. А. Разработка совместного процесса изомеризации-гидроочистки бензиновых фракций. URI: <http://hdl.handle.net/123456789/1673>
5. Алфаяд А.Г., Валиев Д.З., Кемалов Р.А., Кемалов А.Ф. Анализ процесса изомеризация лёгких бензиновых фракций // Природные энергоносители и углеродные материалы & Natural energy sources and carbon materials. – 2021. – № 4(10); URL: energy-sources.esrae.ru/4-51 (дата обращения: 18.12.2021).