

NGHIÊN CỨU MÔ PHÒNG ĐỘNG PHÂN XỬNG ĐỒNG PHÂN HÓA NAPHTHA NHẸ

Nguyễn Trọng Thái^{1,2}, Phạm Thanh Huyền²

¹Công ty TNHH Lọc hóa dầu Nghi Sơn

²Viện Kỹ thuật Hóa học, Đại học Bách khoa Hà Nội

Email: trongthai97@gmail.com

Tóm tắt

Đồng phân hóa naphtha nhẹ là một quá trình quan trọng được sử dụng ở các nhà máy lọc dầu nhằm chuyển hóa phân đoạn naphtha nhẹ chưng cất trực tiếp có trị số octane thấp thành sản phẩm đồng phân hóa có trị số octane cao hơn dùng để pha trộn xăng. Nghiên cứu mô phỏng động sẽ hỗ trợ đắc lực cho quá trình vận hành và hoạt động, nhằm đánh giá thay đổi các điều kiện công nghệ, điều kiện vận hành trong các nhà máy lọc dầu, tính cân bằng vật chất, cân bằng năng lượng và tối ưu hóa các dòng công nghệ trong phân xửng. Nghiên cứu này sử dụng phần mềm mô phỏng Unisim Design (Honeywell/UOP) để mô phỏng, tính toán thông số. Các số liệu thu được có thể sử dụng trong quá trình vận hành, điều khiển công nghệ và tối ưu hóa điều kiện tỷ lệ dòng hydro/hydrocarbon cho phân xửng đồng phân hóa.

Từ khóa: Quá trình đồng phân hóa, hydroisomer hóa, mô phỏng, tối ưu hóa, Unisim Design.

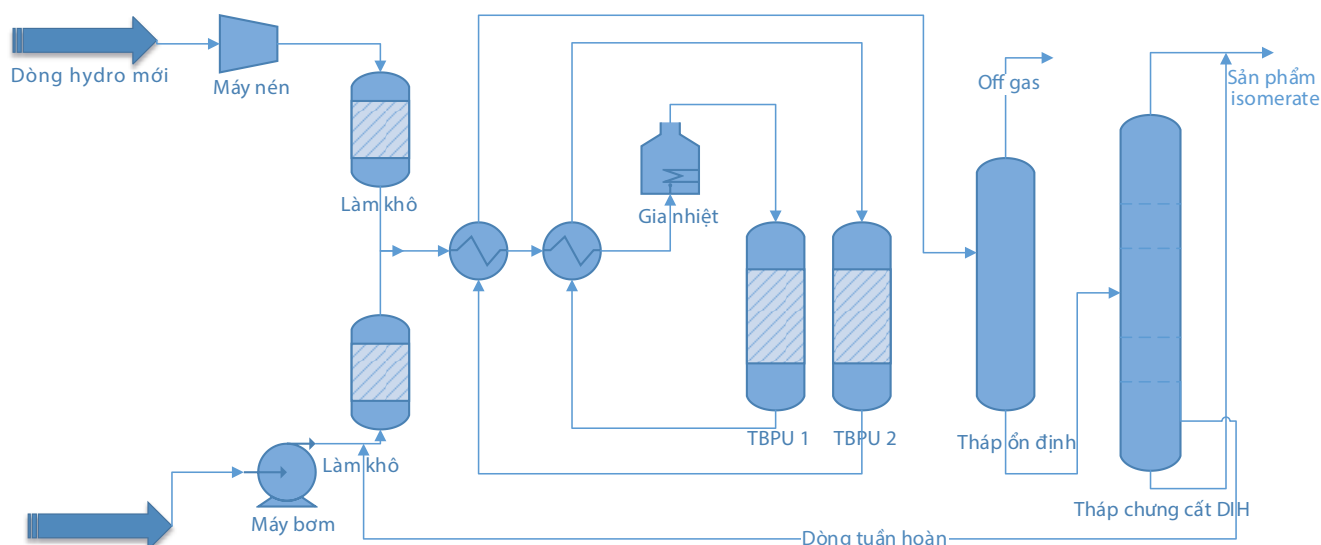
1. Giới thiệu

Phân xửng đồng phân hóa là phân xửng xử lý phần naphtha nhẹ, có trị số octane thấp thành sản phẩm có trị số octane (TSOT) cao hơn nhằm đáp ứng quá trình phối trộn nhiên liệu và tăng hiệu quả kinh tế. Quá trình đồng phân hóa sử dụng phản ứng đồng phân hóa dưới áp suất hydro, chuyển hóa phần n-paraffin C₅, C₆ thành hợp chất iso- có trị số octane cao hơn nhiều so với nguyên liệu ban đầu [1 - 3]. Sơ đồ công nghệ của quá trình đồng phân hóa được trình bày trong Hình 1.

Nguyên liệu naphtha nhẹ có thành phần chủ yếu là nC₅, nC₆ paraffin với TSOT lần lượt là 61,7 và 25, được trộn cùng dòng hydro của nhà máy và đi vào thiết bị phản ứng đồng phân hóa. Ở đây sử dụng 2 thiết bị nối tiếp nhau để

nâng cao hiệu suất của phản ứng. Do phản ứng đồng phân hóa là phản ứng tỏa nhiệt nhẹ nên giữa 2 thiết bị có đặt các thiết bị trao đổi nhiệt để tận dụng và làm giảm nhiệt độ của dòng sản phẩm qua thiết bị phản ứng đầu tiên. Dòng sản phẩm đi ra được đưa vào tháp ổn định, tách phần khí nhẹ thu được trên đỉnh tháp và sản phẩm lỏng dưới đáy tháp. Dòng sản phẩm lỏng được đưa qua tháp chưng cất DIH tách phần nC₆ và methyl pentane có TSOT thấp nhằm tuần hoàn lại tháp phản ứng, tăng hiệu quả quá trình. Sản phẩm cuối thu được là xăng isomere có TSOT 87 - 89.

Phần mềm Unisim của Honeywell được lựa chọn để mô phỏng, tối ưu hóa quá trình. Bài báo trình bày kết quả mô phỏng động công nghệ đồng phân hóa nghiên cứu tối ưu hóa dòng hydro cung cấp cho quá trình phản ứng.



Hình 1. Sơ đồ công nghệ đồng phân hóa [1, 3]

Ngày nhận bài: 19/10/2017. Ngày phản biện đánh giá và sửa chữa: 19/10 - 17/11/2017. Ngày bài báo được duyệt đăng: 13/3/2018.

2. Mô phỏng phân xưởng đồng phân hóa

2.1. Lựa chọn các cấu tử

Các cấu tử mô phỏng được chọn theo danh sách cấu tử như trong tài liệu tham khảo [3] (Hình 2).

2.2. Lựa chọn hệ nhiệt động

Hệ nhiệt động được sử dụng là hệ Peng-Robinson. Đây là hệ nhiệt động phù hợp nhất để tính toán cân bằng lỏng - hơi cũng như tính toán tỷ trọng chất lỏng cho các quá trình xử lý hydro-carbon [4 - 7].

2.3. Thiết lập gói phản ứng

Gói phản ứng được thiết lập gồm: phản ứng đồng phân hóa; phản ứng no hóa vòng benzene; phản ứng mở vòng naphthene và phản ứng hydro cracking [3] (Bảng 1).

2.4. Thiết lập các dòng nguyên liệu

Nguyên liệu cho phân xưởng đồng phân là các dòng naphtha nhẹ (201) từ phân xưởng xử lý hydro và dòng hydro (101) thường được lấy từ phân xưởng reforming xúc tác. Thông số các dòng nguyên liệu được thể hiện trong Bảng 2.

2.5. Thiết lập các thiết bị

Các thiết bị chính và ký hiệu trong phân xưởng đồng phân hóa được trình bày trong Bảng 3.

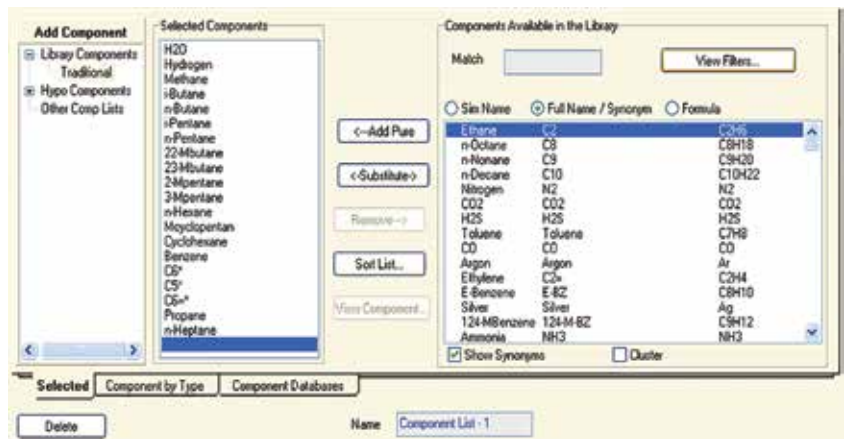
2.6. Thiết lập các vòng điều khiển

Các vòng điều khiển được mô phỏng lại từ các vòng điều khiển thường sử dụng trong thực tế.

3. Kết quả và thảo luận

3.1. Sơ đồ mô phỏng phân xưởng đồng phân hóa

Kết quả mô phỏng động phân xưởng đồng phân hóa được thể hiện ở Hình 3.



Hình 2. Các cấu tử mô phỏng

Bảng 1. Các phản ứng xảy ra trong quá trình

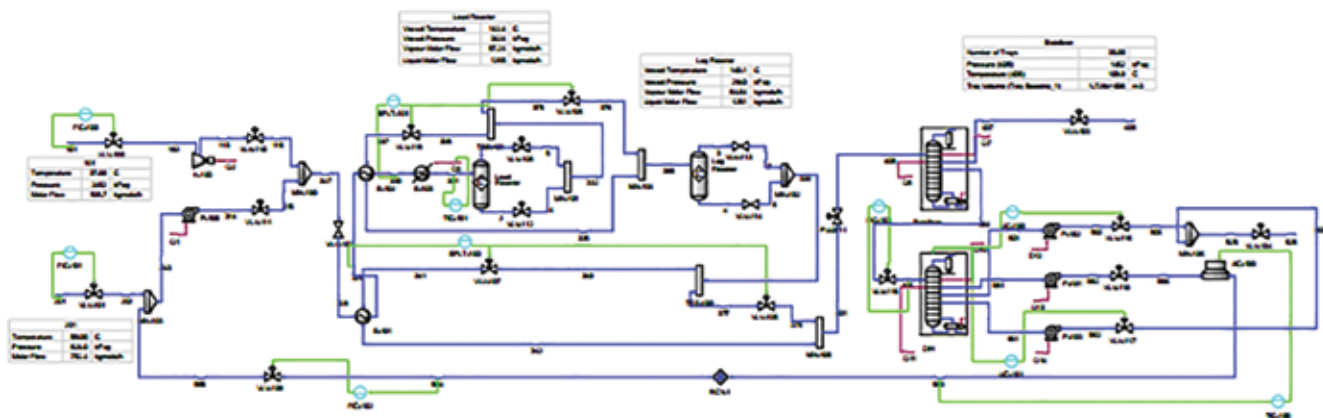
TT	Phản ứng	Loại phản ứng
1	$nC_5 \leftrightarrow iC_5$	Phản ứng đồng phân hóa
2	$nC_6 \leftrightarrow 2MP$	
3	$nC_6 \leftrightarrow 3MP$	
4	$2MP \leftrightarrow 22DMB$	
5	$22DMB \leftrightarrow 23DMB$	
6	$MCP \leftrightarrow CH$	
7	$Benzene \rightarrow CH$	Phản ứng no hóa benzene
8	$CH \rightarrow nC_6$	Phản ứng mở vòng naphthene
9	$MCP \rightarrow nC_6$	
10	$nC_7 + H_2 \rightarrow C_3 + iC_4$	Phản ứng hydro cracking

Bảng 2. Thông số các dòng nguyên liệu

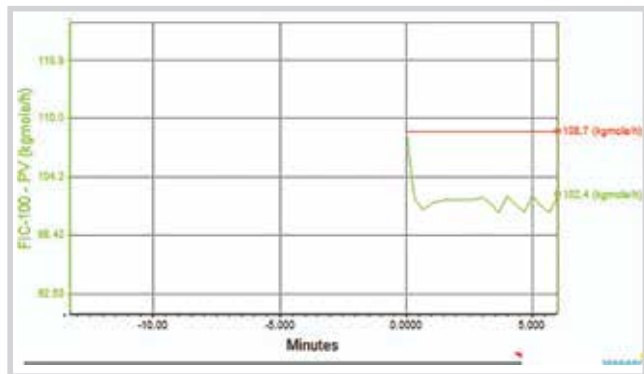
Thông số		Đơn vị	Dòng hydro (% khối lượng)	Dòng naphtha (% khối lượng)
Nhiệt độ		°C	37	59
Áp suất		kPag	2452	824
Thành phần				
Ký hiệu	Cấu tử			
H ₂ O	Nước		2,16	0
H ₂	Hydro		97,05	0
C ₁	Methane		0,79	0
C ₃	Propane		0	0
iC ₄	i-Butane		0	0,03
nC ₄	n-Butane		0	2,77
iC ₅	i-Pentane		0	18,04
nC ₅	n-Pentane		0	30,54
22DMB	22-Dimbutane		0	0,26
23DMB	23-Dimbutane		0	1,44
2MP	2-Mpentane		0	12,01
3MP	3-Mpentane		0	6,97
nC ₆	n-Hexane		0	15,43
nC ₇	n-Heptane		0	3,85
MCP	Methylcyclopentane		0	6,28
CH	Cyclohexane		0	1,13
BZ	Benzene		0	1,25
Tổng			100	100

Bảng 3. Các thiết bị chính của phân xưởng đồng phân hóa

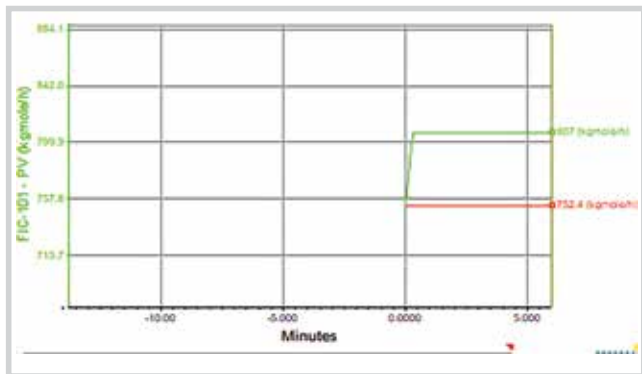
TT	Thiết bị	Ký hiệu
1	Máy nén	K-100
2	Bơm tăng áp	P-100/P-101/P-102
3	Bộ hòa trộn nguyên liệu	MIX-100/MIX 104/MIX-105/MIX-106
4	Thiết bị trao đổi nhiệt	E-101/E-102/E-103
5	Thiết bị phản ứng	Lead reactor/Lag reactor
6	Bộ chia dòng	TEE-100/TEE-101/TEE-104
7	Thiết bị ổn định sản phẩm	Stabilizer
8	Thiết bị chưng tách sản phẩm	DIH
9	Thiết bị gia nhiệt	E-100
10	Thiết bị làm mát bằng không khí	AC-100



Hình 3. Sơ đồ mô phỏng động phân xưởng đồng phân hóa



Hình 4. Thông số hoạt động của dòng hydro



Hình 5. Thông số hoạt động của dòng hydrocarbon

Hình 3 thể hiện thông số cơ bản cần thiết của các vòng điều khiển, các thiết bị và các dòng công nghệ chính của phân xưởng đồng phân hóa.

3.2. Biểu đồ thông số hoạt động của các vòng điều khiển

Hình 4 - 7 thể hiện thông số hoạt động một số vòng điều khiển.

Mô hình mô phỏng động đang vận hành ổn định (từ Hình 4 - 7 đường màu xanh là giá trị công nghệ, màu đỏ là giá trị cài đặt; có thể thấy các giá trị này đang dần đạt ổn định, ít thay đổi). Các vòng điều khiển đáp ứng được yêu cầu công nghệ. Độ mở của các van điều khiển đều nằm

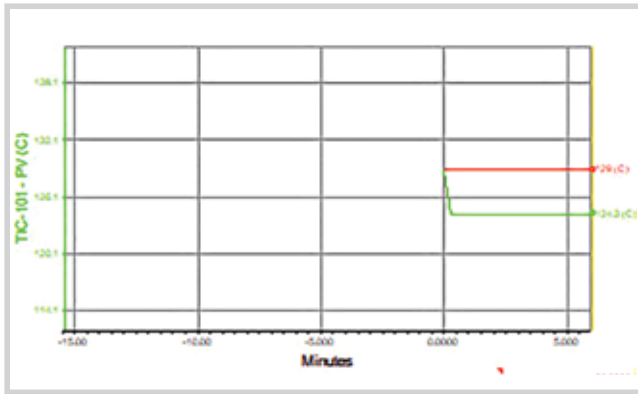
trong khoảng bình thường, cho phép khả năng tăng công suất phân xưởng nếu cần.

3.3. Đánh giá kết quả mô phỏng

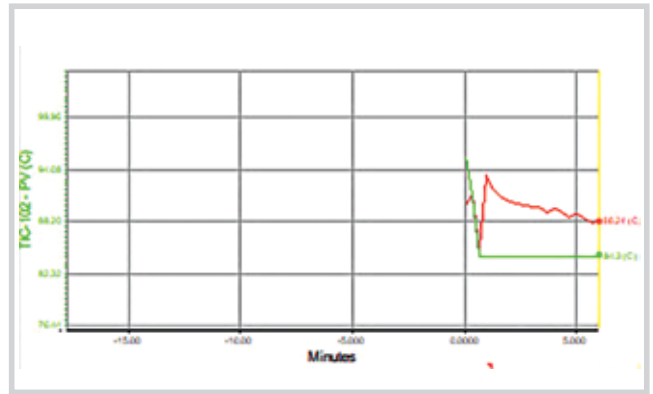
3.3.1. Dòng sản phẩm sau phản ứng

Các thông số thành phần thu được từ quá trình mô phỏng được so sánh với số liệu thực tế trong phân xưởng hydroisomer hóa [3]. Các trị số PIN và x-factor được sử dụng để xác định hiệu quả, độ chuyển hóa và đánh giá kết quả đạt được:

PIN (Paraffin Isomerization Number) là tổng của tỷ lệ 3 sản phẩm (IC₅/C₅P + 22DMB/C₆P + 23DMB/C₆P) theo % khối lượng.



Hình 6. Thông số hoạt động của bộ điều khiển nhiệt độ số 1



Hình 7. Thông số hoạt động của bộ điều khiển nhiệt độ số 2

Trị số PIN đặc trưng cho mức độ phản ứng đồng phân xảy ra sau thiết bị phản ứng. Do đó, chọn dòng sản phẩm đạt được khi đi qua 2 thiết bị phản ứng để tính trị số PIN. Kết quả được trình bày trong Bảng 4.

Đối chiếu số liệu thực tế, kết quả mô phỏng không có sai lệch lớn. So sánh dòng nguyên liệu và dòng sản phẩm cho thấy thành phần các cấu tử chính cần chuyển hóa (nC₆, 3MP) giảm rõ rệt, thành phần các cấu tử mong muốn (22DMB) tăng lên. Các tính chất khác của sản phẩm như RON; các chỉ số PIN, x-factor cũng thay đổi theo. Quá trình chuyển hóa thu được lượng lớn iC₅ tương đương với kết quả thực tế. Sự chuyển hóa thành lượng lớn 22DMB giúp chỉ số PIN đạt được vượt trội so với giá trị tính toán thực tế.

$$X\text{-factor} = \text{Benzene (\%kl)} + \text{cyclohexane (\%kl)} + \text{MCP (\%kl)} + C_{7+} (\%kl)$$

Hệ số x-factor của dòng nguyên liệu đầu vào (dòng 243):

$$X\text{-factor} = 1,25 + 1,13 + 6,28 + 3,85 = 12,51$$

Hệ số x-factor của dòng sản phẩm đầu ra (dòng 401):

$$X\text{-factor} = 0,39 + 0,05 + 1,33 + 0 = 1,77$$

Hệ số x-factor thiết kế của dòng sản phẩm đầu ra:

$$X\text{-factor} = 1,63 + 2,28 + 4,67 + 0 = 8,58$$

Hệ số x-factor đặc trưng cho hàm lượng các sản phẩm không mong muốn trong nguyên liệu ban đầu hoặc sau quá trình phản ứng. Sau phản ứng, khi tiến hành mô phỏng, giá trị x-factor thấp nhất thì quá trình phân

Bảng 4. So sánh thành phần và trị số PIN của dòng nguyên liệu và sản phẩm

Cấu tử	Lưu lượng dòng trước phản ứng (% khối lượng)	Lưu lượng dòng thực tế [3] (% khối lượng)	Lưu lượng dòng sản phẩm mô phỏng (% khối lượng)
C ₃	0	0,08	1,06
iC ₄	0,03	0,94	1,46
nC ₄	2,77	4,20	2,72
iC ₅	18,04	35,97	37,84
nC ₅	30,54	14,60	10,46
22DMB	0,26	9,47	31,68
23DMB	1,44	3,65	4,01
2MP	12,01	11,35	8,81
3MP	6,97	6,61	0,14
nC ₆	15,43	4,55	0,05
MCP	6,28	4,67	1,33
CH	1,13	2,28	0,05
BZ	1,25	1,63	0,39
nC ₇	3,85	0	0
Tổng	100	100	100
iC ₅ /C ₅ P	0,371	0,711	0,783
22DMB/C ₆ P	0,007	0,266	0,709
23DMB/C ₆ P	0,040	0,102	0,090
PIN	0,418	1,080	1,582

Bảng 5. So sánh TSOT trước và sau phản ứng

Cấu tử	RON	Trước phản ứng (% khối lượng)	Isomerase (% khối lượng)	Isomerase thực tế [3] (% khối lượng)
iC ₄	102	0,03	1,46	0,94
nC ₄	94	2,77	2,72	4,20
iC ₅	93	18,04	37,84	35,97
nC ₅	61,8	30,54	10,46	14,60
22DMB	91,8	0,26	31,68	9,47
23DMB	104,3	1,44	4,01	3,65
2MP	73,4	12,01	8,81	11,35
3MP	74,5	6,97	0,14	6,61
nC ₆	24,8	15,43	0,05	4,55
MCP	89,3	6,28	1,33	4,67
CH	84,0	1,13	0,05	2,28
Benzene	120,0	1,25	0,39	1,63
nC ₇	0	3,85	0	0
RON		65,92	87,25	82,31

ứng là tối ưu. Trong khi đó, hệ số x-factor của sản phẩm là 8,58 lớn hơn xấp xỉ 7 đơn vị so với dòng sản phẩm khi mô phỏng.

3.3.2. So sánh chỉ tiêu các sản phẩm của phân xưởng

Như vậy, sau phản ứng, TSOT của nguyên liệu tăng lên 22 đơn vị, thích hợp để pha trộn xăng thương phẩm, kết quả này cao hơn kết quả thực tế được Nikita V.Chekantev và cộng sự [3] công bố.

3.4. Cân bằng vật chất và năng lượng

3.4.1. Cân bằng vật chất

Công cụ Property Balance Utility được sử dụng để tính toán cân bằng vật chất, kết quả thu được như Hình 8.

Sai số rất nhỏ, khoảng 0,83kg/giờ, cho thấy hệ mô phỏng đang vận hành rất ổn định. Mô phỏng động vẫn chịu ảnh hưởng của độ trễ theo thời gian và sự lưu chứa vật chất trong hệ thống.

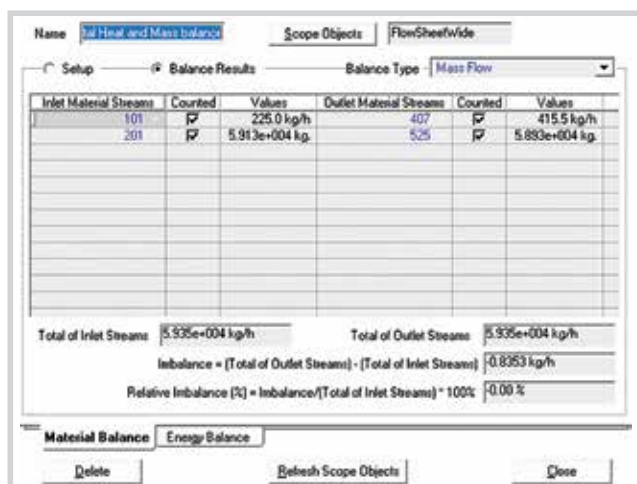
3.4.2. Cân bằng năng lượng

Sử dụng công cụ Property Balance Utility tính được cân bằng năng lượng như Hình 9. Kết quả đưa ra sai số cân bằng năng lượng khoảng 1,08%. Để sát với thực tế, mô phỏng thất thoát nhiệt ra môi trường của một số thiết bị quan trọng được thực hiện nhưng lượng thất thoát không được tính bằng công cụ Property Balance Utility.

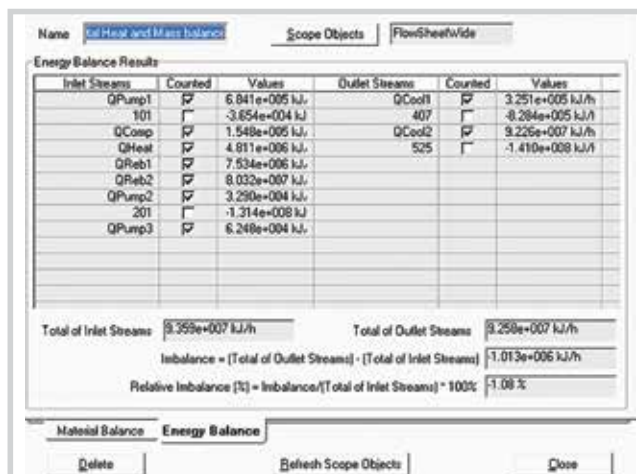
3.5. Tối ưu hóa tỷ lệ dòng hydro/hydrocarbon

Các giải pháp để tối ưu hóa quá trình vận hành của các nhà máy lọc hóa dầu như: tối ưu kế hoạch sản xuất, bảo dưỡng; lựa chọn nguyên liệu, hóa phẩm cho lợi ích cao nhất; tiết kiệm năng lượng và nâng công suất chế biến. Tuy nhiên, trong phạm vi nghiên cứu chỉ trình bày tối ưu hóa dòng hydro cung cấp cho quá trình phản ứng.

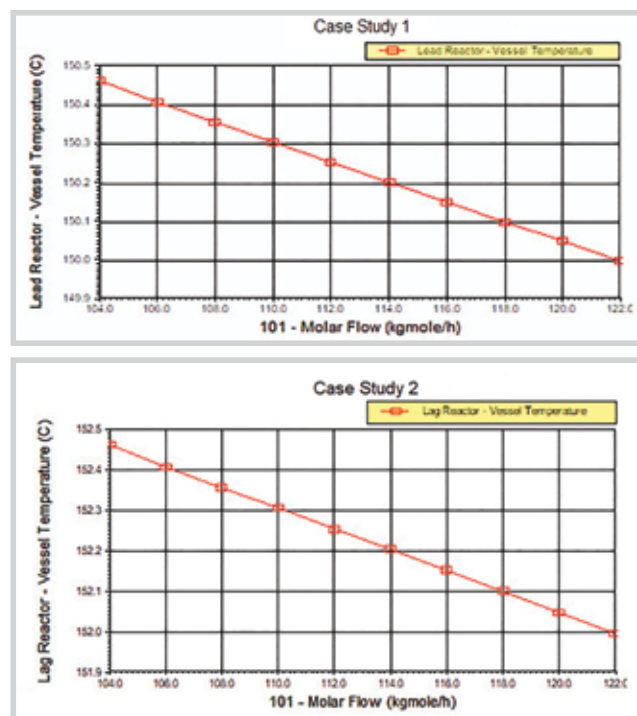
Phân tử hydro không tham gia vào phản ứng đồng phân hóa nên không gây ảnh hưởng lớn đến quá trình đồng phân hóa. Tuy nhiên, quá trình này vẫn hoạt động trong điều kiện môi trường hydro (dưới áp suất hydro) giúp giảm các phản ứng tạo cốc, bảo vệ xúc tác. Hydro tham gia các phản ứng phụ của quá trình isomer hóa (phản ứng bão hòa benzene, phản ứng hydrocracking, phản ứng mở vòng) và được tiêu thụ trong những phản ứng này dù không có nhiều thành phần hydro trong nguyên liệu. Hydro đóng vai trò quan trọng để đảm bảo thời gian hoạt động của xúc tác, đồng thời hàm lượng hydro cũng ảnh hưởng đến quá trình vận hành, cấu trúc thiết bị của phân xưởng.



Hình 8. Kết quả tính cân bằng vật chất



Hình 9. Kết quả tính cân bằng năng lượng



Hình 10. Ảnh hưởng của lưu lượng hydro đến nhiệt độ của thiết bị phản ứng số 1 và 2

Bảng 6. Kết quả khảo sát ảnh hưởng của tỷ lệ hydro/hydrocarbon

Lưu lượng dòng (kgmol/giờ)	Tỷ số hydro/hydrocarbon	Nhiệt độ thiết bị phản ứng		RON sản phẩm
		Lead reactor (°C)	Lag reactor (°C)	
104	0,137	150,5	152,5	87,48
108	0,142	150,4	152,4	87,51
112	0,148	150,3	152,3	87,53
116	0,153	150,1	152,2	87,55

Khảo sát sự ảnh hưởng của lưu lượng hydro đến nhiệt độ ở thiết bị phản ứng số 1 (lead reactor) và số 2 (lag reactor) được trình bày trong Hình 10.

Lượng hydro tăng lên, nhiệt độ duy trì trong các thiết bị phản ứng giảm xuống gây ảnh hưởng đáng kể đến phản ứng cân bằng nên việc xác định lưu lượng tối ưu là điều cần thiết.

Ảnh hưởng của hydro/hydrocarbon đến chất lượng sản phẩm được trình bày trong Bảng 6.

Hydro/hydrocarbon có ảnh hưởng đáng kể trong quá trình sản xuất, giá thành sản xuất hydro rất cao. Vì vậy, lưu lượng mole đầu vào trong phân xưởng hydroisomer hóa tối ưu cần duy trì từ 104 - 108kgmol/giờ.

4. Kết luận

Nghiên cứu đã mô phỏng thành công phân xưởng đồng phân hóa bằng phần mềm Unisim Design, đồng thời mô phỏng thành công các dòng công nghệ chính, các phản ứng chuyển hóa và tách để thu sản phẩm cuối cùng. Kết quả mô phỏng thu được gồm các tính toán về cân bằng vật chất và cân bằng năng lượng, đảm bảo chỉ tiêu sản phẩm của phân xưởng isomer hóa.

Trạng thái mô phỏng động của mô hình ổn định,

thông số điều khiển của các vòng điều khiển rất ổn định theo thời gian, từ đó có thể tiến hành theo dõi, xem xét các yếu tố ảnh hưởng đến thông số công nghệ của quá trình.

Tài liệu tham khảo

1. Honeywell UOP. *www.uop.com*.
2. Viacheslav A.Chuzlov, Emilia D.Ivanchina, Igor' M.Dolganov, Konstantin V.Molotov. *Simulation of light naphtha isomerization process*. Procedia Chemistry. 2015; 15: p. 282 - 287.
3. Nikita V.Chekantev, Maria S.Gyngazova, Emilia D.Ivanchina. *Mathematical modeling of light naphtha (C5, C6) isomerization process*. Chemical Engineering Journal. 2014; 238: p. 120 - 128.
4. Nguyễn Duy Thuận, Trần Quang Hải, Phạm Thanh Huyền. *Mô phỏng và tối ưu hóa, xử lý sự cố trong quá trình vận hành phân xưởng Transalkyl hóa các hydrocarbon thơm (TATORAY)*. Tạp chí Dầu khí. 2016; 9: trang 34 - 45.
5. William L.Luyben. *Plantwide dynamic simulators in chemical processing and control*. CRC Press. 2003.
6. Honeywell. *Dynamic modelling using unisim design*. 2011.
7. Aspen Hysys. *Dynamic modelling*. 2004.

STUDY ON DYNAMIC SIMULATION OF LIGHT NAPHTHA HYDROISOMERISATION PROCESS

Nguyen Trong Thai^{1,2}, Pham Thanh Huyen²

¹Nghi Son Refinery and Petrochemical LLC

²School of Chemical Engineering, HUST

Email: trongthai97@gmail.com

Summary

Hydroisomerisation is one of the most important processes that has been used in refineries to convert low quality light naphtha from CDU (crude distillation unit) into high octane number isomerate for gasoline pool. The dynamic simulation of this process will be applied to evaluate the changes of technological and operational conditions in the refineries, and calculate the material balance and energy balance for optimisation of technologies in the unit. In this research, the hydroisomerisation process will be simulated by Unisim Design software (Honeywell/UOP). The data collected can be used in the operation and control process and optimisation of the hydrogen/hydrocarbon ratio for hydroisomerisation unit.

Key words: Hydroisomerisation, simulation, optimisation, Unisim Design.