

制氢装置的 HYSYS 模型应用探究

中国石化扬子石油化工有限公司芳烃厂 黄 圣

摘要：本文论述扬子芳烃厂合成气车间利用先进化工模拟软件 HYSYS 对车间制氢装置进行软件模型建立的过程，并通过模型对装置重要工艺参数变动所带来的后续影响进行了对比与分析，将理论与实际相结合，促进了车间工艺人员对装置更深层次的了解，提高了装置运行的稳定性。

关键词：HYSYS、天然气制氢、建模

扬子石化芳烃厂制氢装置采用天然气为原料，利用水蒸汽转化法来制取粗氢气，后经 PSA 装置提纯获得 99.9%以上纯氢的生产工艺。装置有 A/B 两系列，每套装置最大可产氢气 37000Nm³/h。

1、制氢 A 系列工艺

装置界区来的天然气与界外返回氢进行一定量的配比, 经过脱硫、脱氯工序, 再与装置自产工艺蒸汽进行充分混合后, 进入高温催化剂反应炉进行水蒸气转化反应, 生成 H₂、CO、CO₂等反应物, 转化后的工艺气在经过高温变换脱除残余 CO, 再经过多次降温脱水, 最后通过 PSA 变压吸附产出高纯氢气送往氢气管网。

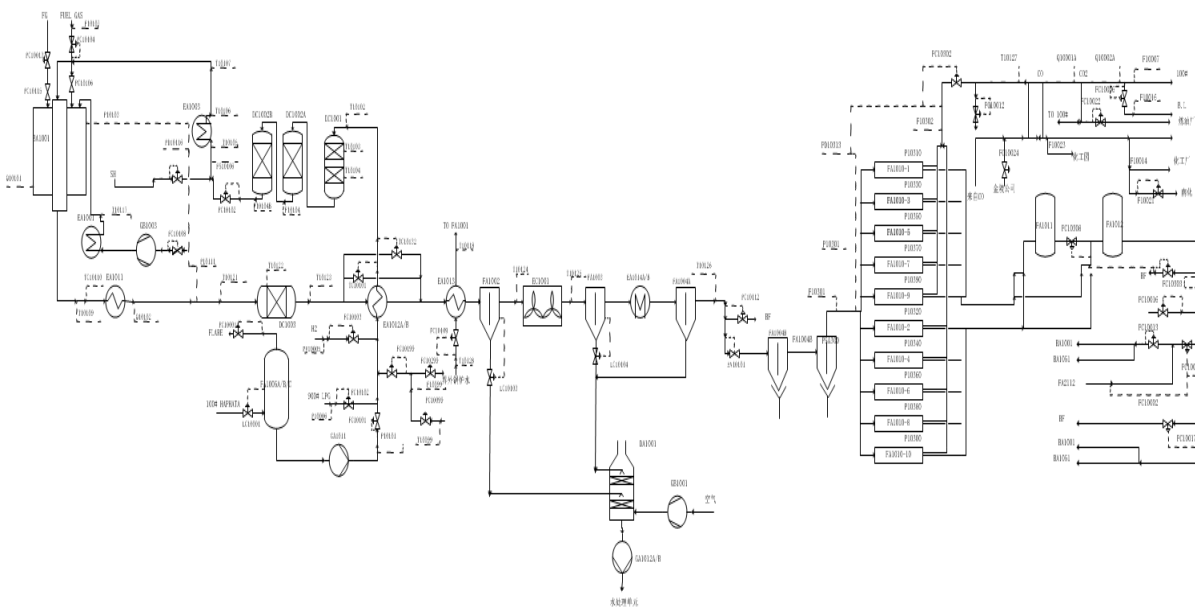


图 1 制氢 A 系列工艺流程图

如图 1 所示为装置工艺流程图，其中有几个参数作为装置的生产控制指标。

(1)原料硫含量。天然气原料中 H₂S 等含硫组分对转化炉催化剂有着破坏性作用，故在原料预处理部分通过多层次净化，将有机硫含量控制在 1ppm 以下。

(2)产品纯度。通过本装置进行天然气转化及高温变换后，要求经过 PSA 吸附分离后的产品氢气纯度达到 99.99%以上，以供其他装置使用。

(3)水烃比。装置转化催化剂在 2013 年进行统一更换后，采用新型“三高一低”催化剂，其中高水碳比可以在提高转化率的同时对炉管有一定保护作用，控制范围在 3.5(t/t)~4.3(t/t)之间。

(4)转化出口温度。转化催化剂在一定的温度下具备高活性的特点，所以通过将转化炉工艺气出口温度控制在 720℃~820℃之间，以适应新型催化剂在不同负荷下活性的需求。

(5)转化出口甲烷含量。转化炉管内甲烷与水蒸气通过高温及催化剂活化，反应成为氢气、一氧化碳及二氧化碳，残余的甲烷则混杂在工艺气中。通过对转化炉出口工艺管线中残余甲烷含量的监测，控制在 5.0%~9.0%之间，稳定转化率。

2、HYSYS 流程模拟

HYSYS 化工流程模拟软件是由化学工程、化工热力学、系统工程、计算方法及计算机技术等多学科理论在计算机上实现的综合模拟系统。在已有定义的反应参数下，建模过程较为便捷。

2.1 定义参数

天然气制氢装置主要反应物为甲烷、水蒸气，经过高温、高压及催化剂活化，反应生成氢气及二氧化碳等附属产物。故选择 PR-T wu 方程作为本次模拟的物性参数包。

根据装置运行实际进料，列出模拟计算的进料流股及组分，如下表 1 所示。

表 1 进料流股参数

	NG（原料天然气）	H ₂ （返回氢）	BFW（锅炉给水）
温度（℃）	40.0	33.2	108.4
压力（MPa）	3.80	3.65	4.95
流量（kg/h）	7770	40	51040
组分（1/1）			
H ₂ O	0.000	0.000	1.000
N ₂	0.021	0.000	0.000
O ₂	0.000	0.000	0.000
H ₂ S	0.000	0.000	0.000
CO	0.000	0.000	0.000
CO ₂	0.005	0.000	0.000
H ₂	0.000	1.000	0.000
CH ₄	0.948	0.000	0.000
C ₂ H ₆	0.020	0.000	0.000

2.2 单元建模

由于整套装置中的换热网络较为复杂，在进行初次模型建立时，我们将装置分为原料加热处理、反应炉、高变降温、变压吸附、TP 水回收五个单元模块，先利用 HYSYS 软件将每一个模块进行单

独模拟运算，确认各单元大致参数范围后，再将各单元进行前后流程的对接以及换热流股的一一对应。

以转化炉单元为例，下表 2 为在转化炉单元重要参数的控制范围。

表 2 转化炉单元重要参数控制范围

	参数	指标
1	转化入口温度	455℃~500℃
2	转化入口压力	2.9MPa~3.1MPa
3	转化出口温度	720℃~820℃
4	转化出口压力	2.7MPa~2.9MPa
5	转化出口残余甲烷含量	5.0%~9.0%
6	转化出口烟气氧含量	2.0%~10.0%
7	烟道气出炉膛温度	< 970℃

在 HYSYS 稳态环境中建立转化炉反应器模型，添加进料、出料流股；设定进料流股的温度、压力、流量、组分等参数；在反应选项中添加反应方程式，设定反应转化率为 37%；添加能量流股 Q*，并设定初始热值；点击确认模块建立。根据出料流股的物性调节能量流股 Q*，使得达到控制指标范围。如下图 2 为转化炉单元模型建立窗口。



图 2 转化炉 BA1001 模型窗口

2.3 装置建模

将分单元模型进行流程的衔接，用前单元的出料组分代替在单元建模是设定的虚拟单元进料组分，并分别进行模块的参数调整，确认各指标参数在控制范围内。

装置建模的流程总图如下图 3 所示。

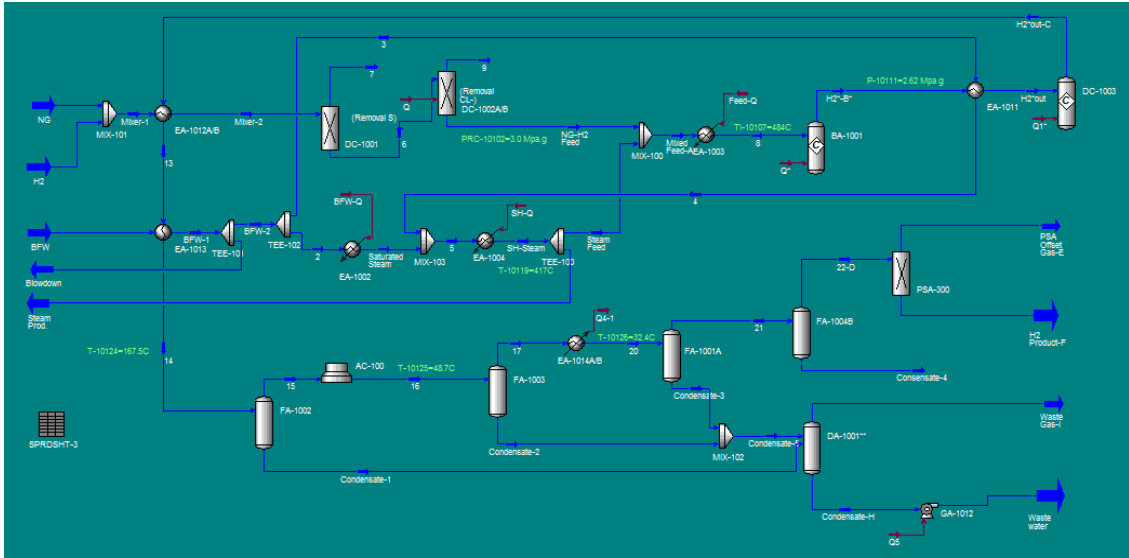


图 3 制氢装置 HYSYS 建模总图

模型的主要出料流股参数如表 3 所示。

表 3 出料流股参数

	Pro H ₂	PSA 废气	Pro Steam
温度 (°C)	33.2	39.7	417.0
压力 (MPa)	2.40	2.40	3.64
流量 (m ³ /h)	34.76	30.15	13.86
组分 (1/1)			
H ₂ O	0.000	0.007	1.000
N ₂	0.000	0.015	0.000
O ₂	0.000	0.000	0.000
H ₂ S	0.000	0.000	0.000
CO	0.000	0.040	0.000
CO ₂	0.000	0.500	0.000
H ₂	1.000	0.284	0.000
CH ₄	0.000	0.155	0.000
C ₂ H ₆	0.000	0.000	0.000

3、模型应用分析

为了能够对装置生产中的主要影响参数进行分析，从而进一步指导装置生产的调整，我们通过已建立的 HYSYS 稳态模型对影响因子水碳比进行模拟分析。

(1) 水烃比对变换气组成的影响

如下图 4 所示，随着水烃比的增加，蒸汽转化反应中残余 CH₄ 含量逐渐减少，变换反应中残余 CO₂ 含量逐渐在增加，对产品氢气的转化率有着正向的作用。同时我们可以看到，当水烃比继续增加至更高值时，对蒸汽转化反应和高温变换反应的影响逐步降低，尤其是在水烃比高于 5 后，影响

效果大幅减少，而相对的装置配入的蒸汽量却在继续增加。

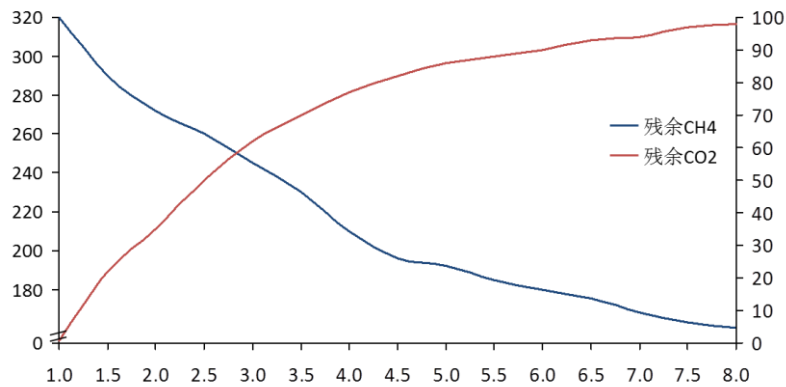


图 4 水烃比对残余 CO₂及残余 CH₄含量的影响

(2) 水烃比对升温热及反应热的影响

如下图 5 所示，随着水烃比的增加，需要将转化炉管加热到反应温度的热能直线上升；而转化反应所需的反应热并不是随着水烃比的增加而同步增加，当水烃比提高的一定值时，转化反应所需的热能趋于稳定。说明催化剂的转换率已经较高，无法再通过提高水烃比和反应热来进一步增加氢气转化率。

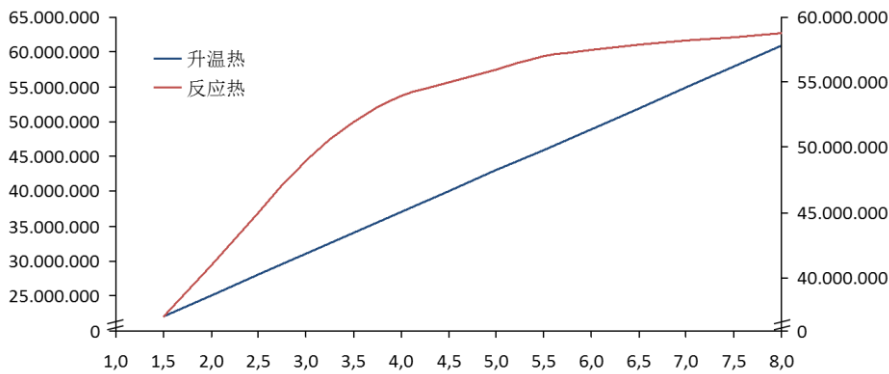


图 5 水烃比对升温热及反应热的影响

4、总结与讨论

通过对 HYSYS 的模型对比与分析，能够利用模型推演的方式对装置的部分重要工艺参数的设定提供相应的理论支持和修订建议，对正常操作或异常波动时进行定性及定量的分析，为装置运行生产提供了较为可靠的保障。

参考文献：

[1] 王云峰. HYSYS 动态模拟系统在芳烃装置上的应用[C]//祁英, Martin Devine. AspenTech China 2003 信息化论坛暨中国用户会论文集. 2003:D1171-D1175.

[2] 姚春旭. 川东北高含硫天然气脱硫脱碳工艺研究[D]. 北京:中国石油大学, 2011.

[3] 叶宗君. Hysys 流程模拟软件的应用[C]//2001 石油炼制技术大会. 2012:1005-1009.