

合成棕榈酸异丙酯反应精馏塔的模拟优化

Simulation Optimization of Reactive Distillation Column for Synthesis of Palmitic Acid Isopropyl Ester

司文学¹ 任丹²

1. 中国恩菲工程技术有限公司, 北京 100038

2. 中航锂电(洛阳)有限公司, 河南 洛阳 471000

SI Wen-xue¹ REN Dan²

1.Chinese Enfei Engineering Technology Co. Ltd., Beijing 100038,China;

2.China Aviation Lithium Battery Co. Ltd., Luoyang 471000, China

【摘要】本文介绍了一种以反应动力学为基础,并借助 Aspen Plus、Fortran 软件模拟以棕榈酸和异丙醇为原料,在反应精馏塔中发生酯化反应生成棕榈酸异丙酯和水的方法。该方法可以指导棕榈酸酯生产装置的工艺优化,具有良好的应用前景。

【Abstract】This paper introduces a kind of method based on the kinetics of reaction, and the method is to simulate palmitic acid and isopropyl alcohol in the reaction distillation column to produce palmitic acid, isopropyl ester and water with the help of Aspen, Plus and Fortran software. The method can guide the optimization of the production process of palmitic acid grease and has a good application prospect.

【关键词】 Aspen Plus ; Fortran ; 反应精馏塔

【Keywords】 Aspen Plus; Fortran; reactive distillation column

棕榈酸异丙酯是生产化妆品的基本原料,工业上生产棕榈酸异丙酯的主要的方法是异丙醇与棕榈酸直接发生酯化反应。由于这个过程是一个可逆反应过程,而且反应生成的水与异丙醇能形成共沸物。

虽然生产棕榈酸异丙酯已有较长的时期,但对研究基本上是依靠实验设备完成的,不仅效率低下而且难以完成复杂条件下的实验研究,特别是一些物性数据的处理费时费力。本文就介绍了一种借助 Aspen Plus 软件,并考虑了反应动力学对反应精馏塔反应段的影响,取得了良好的模拟计算效果,对生产装置的优化生产具有很好的指导意义。

1 酯化反应^[1~4]

1.1 化学反应方程式

棕榈酸 (PA) + 异丙醇 (IPA) = 棕榈酸酯 (IPP) + 水 (W) $\Delta H=18.9\text{kJ/mol}$

1.2 化学反应动力学

基于LHHW模型的液相反应速率:

$$r = k_f * \exp\left(-\frac{E_0}{RT}\right) * \frac{\alpha_{IPA}\alpha_{PA} - \alpha_{IPP}\alpha_W K_{a,eq}}{1 + K_{IPA}\alpha_{IPA} + K_{PA}\alpha_{PA} + K_W\alpha_W} K_{a,eq}^2$$

反应平衡常数: $K_{a,eq} = 1256 * \exp\left(-\frac{1505}{T}\right)$

常数: $k_f=6000\text{mol}/(\text{g}\cdot\text{s})$ 、 $E_0=35\text{kJ}/\text{mol}$ 、 $R=8.314\text{J}/(\text{mol}\cdot\text{K})$

近似常数: $K_{IPA}=0.0966$ 、 $K_{PA}=0.0049$ 、 $K_W=0.6483$

活度由 Aspen Plus 通过 UNIQUAC 模型计算。

2 建立 Aspen Plus 模型

参与酯化反应的几种物质沸点分别是:

IPA (82.25℃) < W (100℃) < IPP (326.75℃) < PA (351℃)

从目前实际的生产情况来看,反应精馏塔的再沸器温度一般不超过150℃,所以生成的IPP基本上都从塔低产品B中采出,而且B中必定要混有IPA。另外,反应生成的水则基本上都从塔顶冷凝器中采出,而未反应的PA一般存在于塔低B中,未反应的IPA除了与水形成共沸物从塔顶产品D采出外,剩余的则取决于塔的操作条件。

本文介绍的方法综合使用了 Fortran 与 Aspen Plus 软件进行模拟计算。首先将反应动力学公式写成 Fortran 子程序,然后将其编译成可供 Aspen Plus 的 RadFrac 模块调用的 d11 文件,并在 Aspen Plus 中建立酯化反应的正、逆反应后关联此文件即可。本文中的 RadFrac 模块具有以下特点:

(1) 共有13个理论级:1级为全凝器、2~4级为精馏区、5~9级为反应区、10~12级为提馏区、13级为再沸器。

(2) 进料位置:物料F1进入第5级、物料F2进入第10级。

(3) 塔内直径0.102m,反应区为KERAPAK型填料,其余为BX型填料。

3 装置优化

本文主要研究影响IPP产量及其纯度的因素。在反应精馏塔设置基础上,分别改变以下因素,查看其对塔低产品B中IPP流量(WF, mol/h)、塔低产品B中IPP摩尔浓度(WPURE)的影响。

表1 塔低产品采出量的影响

B:F1	0.6	0.8	1	1.2	1.4	1.6
WF, kmol/h	0.0149	0.0149	0.0149	0.0149	0.0148	0.0145
WPURE	0.833	0.624	0.499	0.415	0.352	0.301
再沸器温度,℃	173.9	141.6	133.5	129.9	126.8	123.4

表2 PA进料量的影响 (IPA=0.03kmol/h)

F1, kmol/h	0.01	0.02	0.03	0.04	0.05	0.06
WF, kmol/h	0.0049	0.0099	0.0149	0.0199	0.0245	0.0286
WPURE	0.5	0.499	0.498	0.497	0.489	0.478

表3 IPA进料量的影响 (PA=0.03kmol/h)

F2, kmol/h	0.02	0.03	0.04	0.05	0.06	0.07
WF, kmol/h	0.0149	0.0149	0.0149	0.0149	0.0149	0.0149
WPURE	0.494	0.498	0.499	0.499	0.499	0.499

表4 反应段持液量的影响

反应段持液量, mol	20	30	40
WF, kmol/h	0.0149	0.0149	0.0149
WPURE	0.499	0.499	0.499

表5 反应段总理论级数的影响

反应段总理论级数	2	5	8
WF, kmol/h	0.0145	0.0149	0.0149
WPURE	0.486	0.499	0.5

表6 塔顶压力的影响

塔顶压力, bar	2	3	4
WF, kmol/h	0.0149	0.0149	0.0149
WPURE	0.499	0.499	0.499

表7 物料F1浓度的影响

摩尔浓度PA/IPA	塔顶冷凝器		再沸器	
	MCal/h	°C	MCal/h	°C
9	-0.571	122.1	1.286	200.707
3	-0.559	120.88	1.041	155.975
1	-0.5384	119.7	0.863	133.518

从以上结果可以看出:

(1) 塔低产品中IPP的流量随着反应段总理论级数的增加而增加,但在反应段理论级数达到5后,塔低产品中的IPP流量就基本不变了。

(2) 在IPA过量的情况下,IPP的产量与PA进料量成正比关系,而且PA基本上完全反应,而与IPA的过量多少、反应压力、塔板持料量无关。

(3) 塔低产品采出量越少,再沸器温度及IPP浓度就越高,但IPP量基本不变。

(4) F1中PA的浓度越高,再沸器的温度及功率就越大,IPP浓度和量越高。

4 优化

在工业生产中,再沸器一般都不超过150°C,尽管高温能提高IPP产品的浓度,但高温对催化剂的要求较高。所以,该反应精馏塔较适宜的条件为:压力=3bar、塔低采出量B:F1=1、进料量IPA/PA=1、反应段理论级数≥5。此时塔的冷凝器温度是119.7°C、再沸器温度是133.5°C,全塔物料平衡如下表8所示:

表8 全塔物料平衡表

物料	流量	各组分的摩尔含量			
	kmol/h	IPA	PA	IPP	W
F1	0.03	0.5	0.5		
F2	0.03	0.99			0.01
D	0.03	0.494	323 PPB	280 PPM	0.506
B	0.03	0.497	0.001	0.498	0.003

反应段各理论级各组分正、逆反应的总反应速率如下表9所示:

表9 反应段各理论级的总反应速率

反应段理论级	5	6	7	8	9
比速率, mol/h	13.926	0.633	0.252	0.107	0.046

5 结论

以LHHW模型为基础的反应动力学能够较好地反映生成棕榈酸丙酯的脂化反应过程,同时,应用该动力学公式并结合Aspen Plus、Fortran软件能够较快地对反应精馏塔进行优化设计,进一步地可以将该技术应用到其他相似的可逆反应精馏的优化设计中,具有很好的应用前景。

参考文献:

[1] Production of isopropyl palmitate in a catalytic distillation column: Experimental studies, S. Bhatia, A.L. Ahmad, A.R. Mohamed, S.Y. Chin, Chemical Engineering Science 61(2006):7436-7447.

[2] Production of isopropyl palmitate in a catalytic distillation column: Comparison between experimental and simulation studies, S. Bhatia, A.R. Mohamed, A.L. Ahmad, S.Y. Chin, Computers and Chemical Engineering 31(2007):1187-1198.

[3] 朱自强,徐汛.化工热力学[M].北京:化学工业出版社,2001.

[4] 郭天民.多元汽液平衡和精馏,第一版[M].北京:化学工业出版社,1983.