

Simulation and Optimization of Ethylene Cracking Furnace Based on Reaction Kinetics

Yu Wang^{1,2}

1. Xi'an University of Science and Technology, Xi'an, Shaanxi, 710000, China

2. Second Branch of Olefins Division Guoneng Group Ningxia Coal Industry Company, Yinchuan, Ningxia, 750411, China

Abstract

To address the issues of low energy efficiency and difficult optimization of ethylene yield in ethylene cracking furnaces, this study focuses on the key equipment, the ethylene cracking furnace. Based on the Aspen Plus software, a full-process model coupling molecular reaction kinetics and coking kinetics was constructed. By comparing the simulation errors of the Kumar model and the 25 reaction kinetics model, it was determined that the 25 reaction kinetics model (with an ethylene yield error <8%) is more suitable for industrial cracking processes. The Kumar Coking Model II (with a hydrogen yield error of 2.16%) was used to describe the coking behavior of the furnace tubes. A systematic analysis was conducted on the effects of parameters such as feedstock, temperature, pressure, and vapor-to-hydrocarbon ratio on ethylene yield and effective energy loss. The results show that naphtha feedstock at 910°C, 4.5 bar, and a vapor-to-hydrocarbon ratio of 0.35-0.5 achieves an ethylene yield of 33.13wt%, with optimal economic performance. The radiant section is the primary source of effective energy loss (accounting for 62.38%).

Keywords

ethylene cracking furnace; reaction kinetics; Aspen Plus simulation; energy efficiency analysis

基于反应动力学的乙烯裂解炉模拟及优化研究

王瑜^{1,2}

1. 西安科技大学, 中国·陕西 西安 710000

2. 国能集团宁夏煤业公司烯烃二分公司, 中国·宁夏 银川 750411

摘要

为解决乙烯裂解炉能效低、乙烯产率难优化的问题,以关键设备乙烯裂解炉为研究对象,基于Aspen Plus软件构建耦合分子反应动力学与结焦动力学的全流程模型。通过对比Kumar模型与25反应动力学模型的模拟误差,确定25反应动力学模型(乙烯产率误差<8%)更适用于工业裂解过程;采用Kumar结焦Model II(氢气产率误差2.16%)描述炉管结焦行为。系统分析原料、温度、压力、汽烃比等参数对乙烯产率及有效能损失的影响,结果表明:石脑油原料在910°C、4.5 bar、汽烃比0.35-0.5条件下,乙烯产率达33.13wt%,且经济性最优;辐射段为有效能损失主要来源(占比62.38%)。

关键词

乙烯裂解炉; 反应动力学; Aspen Plus模拟; 有效能分析

1 引言

乙烯作为石油化工产业的核心基础原料,其产能与质量直接决定了塑料、合成橡胶、精细化工等下游产业的发展水平,是衡量国家工业化程度的关键指标。蒸汽裂解工艺作为当前乙烯生产的主流技术(占比超90%),其核心设备乙烯裂解炉的能耗占全流程总能耗的65%以上^[1],且碳排放强度高,节能降耗潜力巨大^[2]。

由于多数动力学模型未耦合结焦行为,难以反映炉管

结焦对传热与产率的长期影响,能效分析多局限于能量核算,缺乏基于有效能理论的不可逆损失定位,因此,本研究通过Aspen Plus构建耦合反应动力学与结焦动力学的全流程模型,结合有效能分析识别能效瓶颈,为乙烯裂解炉的高效优化提供系统性解决方案。

2 乙烯裂解炉动力学模型构建与验证

2.1 动力学模型选择与验证

2.1.1 Kumar模型验证

Kumar模型包含1个一次反应与21个二次反应,普适性较强,但需将石脑油设为虚拟组分(密度0.701g/mL,分子量87.81)。在Aspen Plus中输入反应方程与动力学参数,模拟条件为:温度1073 K、石脑油流量0.5cm³/min、汽烃

【作者简介】王瑜(1987-),男,中国陕西榆林人,本科,工程师,从事材料与化工研究。

比 1.42。结果显示，乙烯产率误差达 -30%，丙烯误差 -94%（表 2.1），主要因虚拟组分无法真实反映石脑油复杂组成，模拟结果偏离工业实际。

表 2.1 Kumar 模型产率与 Aspen Plus 模拟结果对比

产品	Kumar 模型产率	Aspen Plus 产率	误差
C ₂ H ₄	16%	11.2%	-30%
C ₃ H ₆	10%	0.6%	-94%

2.1.2 25 反应动力学模型验证

通过文献查找发现，张朝环^[3]通过对齐鲁石化北方裂解炉进行模拟计算，由于裂解都为轻质油，其各组分确定并且 C 原子数均小于 4，建立了确定反应物组分的具体的动力学数学模型，整个模型共计 25 个反应式。采用相同模拟方法，结果显示：乙烯产率误差 -7.6%，乙烷误差 -4.2%，氢气误差 -4.8%（表 2.4），误差显著低于 Kumar 模型，可作为本研究的动力学基础。

表 2.4 25 反应动力学产率与 Aspen Plus 模拟结果对比

产品	25 反应动力学产率 (wt%)	Aspen Plus 产率 (wt%)	误差
H ₂	1.85	1.76	-4.8%
CH ₄	10.6	4.5	-57.5%
C ₂ H ₄	33.13	30.6	-7.6%
C ₂ H ₆	12.67	12.14	-4.2%
C ₄ H ₁₀	0.163	0.15	-7.97%
C ₅ 以上	3.56	4.6	29.2%

2.2 结焦动力学模型建立

炉管结焦会增加热阻与压降，缩短运行周期。采用

Kumar 结焦 Model II 进行动力学模拟，通过对比模拟与工业氢气产率（误差 2.16%），验证该模型可准确预测结焦速率（图 1），结焦速率随温度升高呈指数增长，1000℃以上增速显著加快。

表 2.5 氢气生成摩尔分率的验证

产品	25 反应动力学产率 (%v/v)	Aspen Plus 产率 (%v/v)	误差
H ₂	1.85	1.89	-2.16%

3 乙烯裂解炉全流程建模与参数优化

3.1 裂解炉结构与建模方法

乙烯裂解炉由对流段、辐射段与急冷系统组成：

对流段建模：采用 Heater 模块模拟原料预热 (FPH-1/2)、蒸汽过热 (HTC) 与锅炉给水加热 (ECO-1/2)，用 HeatX 模块模拟急冷换热器 (TLE)，将裂解气从 847.2℃ 冷却至 508℃，同时产生 9-12 MPa 高压蒸汽；

辐射段建模：以 RPlug 模块模拟裂解反应，RGibbs 模块模拟燃料气燃烧（燃料气组成表 7，压力 1 bar，过剩氧 3-5%），出口烟气温度 1200℃；

3.2 工艺参数对乙烯产率的影响

3.2.1 原料影响

对比石脑油、纯乙烷、纯丙烷、乙烷-丙烷混合物 (0.8:0.2) 的乙烯生成量（表 8）：纯乙烷乙烯质量流率最高 (5482.46 kg/h)，但石脑油 (5288.23 kg/h) 因价格低、来源广，经济性更优，故选择石脑油为基准原料。

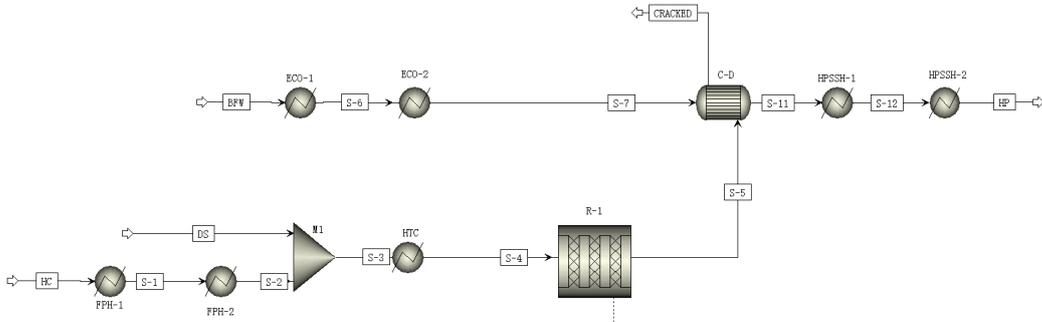


图 3.1 对流段与冷却系统的建模

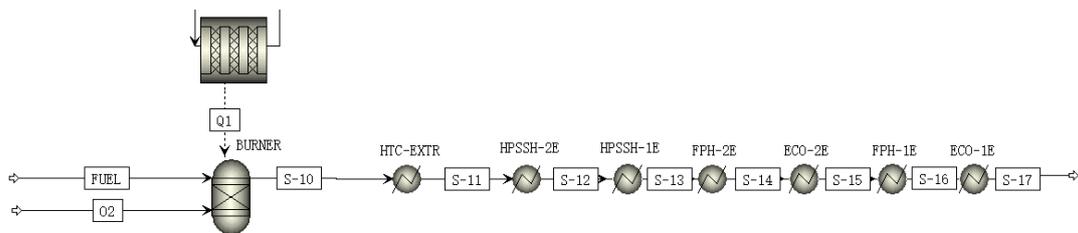


图 3.2 负荷转移整体效果

表 3.1 不同原料对乙烯生成的影响

原料	原料转化率 (%)	乙烯质量流率 (kg/h)
石脑油原料	0.524	5288.23
纯乙烷	0.572	5482.46
纯丙烷	0.683	2887.14
0.8 乙烷, 0.2 丙烷	0.586	4698.96
纯丙烯	1.000	431.124
纯丁烷	1.000	5436.28

3.2.2 温度影响

通过灵敏度分析 (750-1450℃) 发现, 乙烯产率随温度升高先增后减, 910℃时达峰值。温度过低则裂解不完全, 过高则加剧二次裂解与结焦, 导致乙烯选择性下降。

3.2.3 压力影响

压力对乙烯产率呈非线性影响 (图 3.2): 低压 (<4.5 bar) 有利于热力学平衡向气相体积增大的主反应移动, 但反应速率降低; 高压 (>4.5 bar) 虽加快反应, 却促进结焦。4.5 bar 时乙烯产率达 0.2125 (摩尔分率), 为最优压力。

3.2.4 汽烃比影响

汽烃比 (0.2-1.0) 升高可降低烃分压、抑制结焦, 但会稀释反应物浓度。汽烃比 0.35-0.5 时, 乙烯产率与抑焦效果平衡, 过高则导致热负荷增加、能效下降。

4 热损失分析与有效能损失分布

4.1 热损失分析

辐射段: 将辐射段炉壁的热损定义为 $Q_{wall-loss}$, 炉体面积为 A_{wall} , 炉壳表面平均温度为 T_{avg} , 环境温度为 T_{air} , 炉壳总传热系数为 U_{wall} ($W/m^2 \cdot k$) 我们以常见的乙烯裂解炉为例, 长宽高分别为 25m, 5m, 6m, 则 $A_{wall}=610m^2$ 。而 U_{wall} 乙烯裂解炉一般范围为 1-3 ($W/m^2 \cdot k$), 我们采取中等保温的炉子, 所以取 $U_{wall}=2$ ($W/m^2 \cdot k$), 炉壳平均温度在 280℃, 环境温度一般在 30℃, 而热损失公式为:

$$Q_{wall-loss} = A_{wall} * U_{wall} * (T_{avg} - T_{air})$$

通过计算得出 $Q_{wall-loss}=305kW$ 。

对流段: 通过工业烟道气出口温度反推, 采用 MHeatX 模块模拟, 各换热单元热损失如表 4.1 所示。

4.2 有效能损失分布

全系统总有效能损失 36295.38 kW, 辐射段损失最大

(22640.00 kW, 占比 62.38%), 其次为对流段 (12549.23 kW, 34.57%), 冷却系统最小 (1106.15 kW, 3.05%) (表 4.2)。辐射段高损失源于燃烧不完全与高温传热不可逆, 需优先优化。

表 4.1 对流段每一段传热热损失

模块	热损失 (Gcal/h)
ECO1	0.201
FPH1	0.451
ECO2	0.382
FPH2	0.602
HPSSH1	1.767
HPSSH2	3.329
HTC	0.248

表 4.2 乙烯裂解炉有效能损失

模块	有效能损失 (kW)	占比 (%)
对流段	12549.23	34.57
辐射段	22640.00215	62.38
冷却系统	1106.15113	3.05
总计	36295.38328	100

5 结语

25 反应动力学模型 (乙烯产率误差 < 8%) 与 Kumar 结焦 Model II (氢气误差 2.16%) 可精准描述乙烯裂解与结焦过程, 适用于工业裂解炉模拟; 石脑油原料在 910℃、4.5 bar、汽烃比 0.35-0.5 条件下, 乙烯产率达 33.13 wt%, 且经济性最优; 辐射段为有效能损失核心区域 (占比 62.38%), 需通过优化燃烧器结构与炉管排布降低损失;

参考文献

- [1] Benfeng Yuan, Yu Zhang, Wenli Du, Meihong Wang, Feng Qian. Assessment of energy saving potential of an industrial ethylene cracking furnace using advanced exergy analysis[J]. Applied Energy, 2018, 113583(254):1-2.
- [2] 陈梦君, 陈贤雷, 毛玲娟. 基于 SPYRO 的以柴油为原料乙烯裂解炉模拟与优化 [J]. 当代化工, 2023, 52 (4): 914-919.
- [3] 张朝环. 乙烯裂解炉内燃烧与裂解反应过程数值模拟 [D]. 天津: 天津大学, 2008.