

# MÔ PHỎNG VÀ TỐI ƯU HÓA, XỬ LÝ SỰ CỐ TRONG QUÁ TRÌNH VẬN HÀNH PHÂN XỬNG TRANSALKYL HÓA CÁC HYDROCARBON THƠM (TATORAY)

KS. Nguyễn Duy Thuận<sup>1,2</sup>, KS. Trần Quang Hải<sup>1</sup>  
PGS.TS. Phạm Thanh Huyền<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Công ty TNHH Lọc hóa dầu Nghi Sơn

<sup>2</sup>Viện Kỹ thuật Hóa học, Đại học Bách khoa Hà Nội

Email: duythuan@gmail.com

## Tóm tắt

Các nhà máy lọc dầu sử dụng các phần mềm mô phỏng để đánh giá khả năng tối ưu hóa quá trình vận hành và phân tích, xử lý các sự cố, góp phần làm tăng hiệu quả sản xuất và độ tin cậy, ổn định của công tác vận hành. Nghiên cứu này sử dụng phần mềm bản quyền Unisim Design của Honeywell UOP để mô phỏng động Phân xưởng transalkyl hóa các hydrocarbon thơm (Tatoray) của UOP; đồng thời phân tích, đánh giá khả năng tối ưu hóa và đề xuất phương pháp xử lý một số sự cố thường gặp trong quá trình vận hành.

**Từ khóa:** Transalkyl hóa hydrocarbon thơm, Tatoray, Honeywell/UOP, mô hình động học, tối ưu hóa, xử lý sự cố.

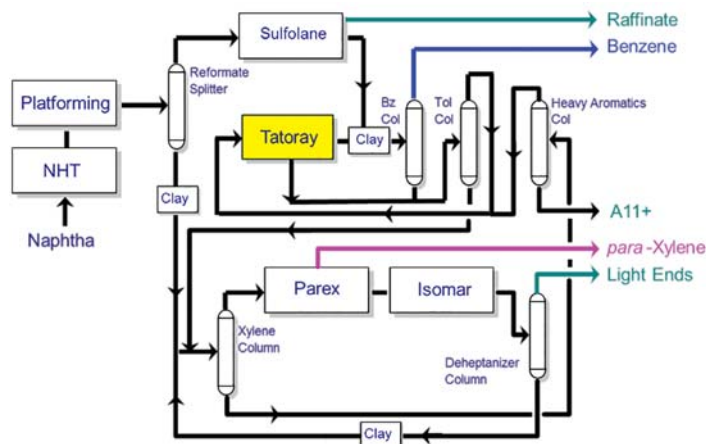
## 1. Giới thiệu

Mô phỏng các quá trình công nghệ hóa học và công nghệ chế biến dầu khí, công nghệ tổng hợp hữu cơ hóa dầu có thể được thực hiện bằng các phần mềm như: PRO/II, DYNsIM (SimSci-Esscor), Aspen HYSYS (AspenTech), PetroSim (KBC), UniSim Design (Honeywell/UOP), OLGA (SPT Group), Indiss (RSI)... Ở Việt Nam, các phần mềm mô phỏng được sử dụng nhiều tại các trường đại học, các viện nghiên cứu và các nhà máy lọc dầu. Phần mềm UniSim Design, Aspen HYSYS đã được đưa vào giảng dạy và sử dụng tại Đại học Bách khoa Hà Nội, Đại học Mỏ - Địa chất, Trung tâm Nghiên cứu và Phát triển Chế biến Dầu khí (PVPro) - Viện Dầu khí Việt Nam. Phần mềm PetroSim được sử dụng tại Nhà máy Lọc hóa dầu Dung Quất và Liên hợp Lọc hóa dầu Nghi Sơn trong quá trình đào tạo, thiết kế, vận hành, bảo dưỡng và tối ưu hóa hoạt động của nhà máy.

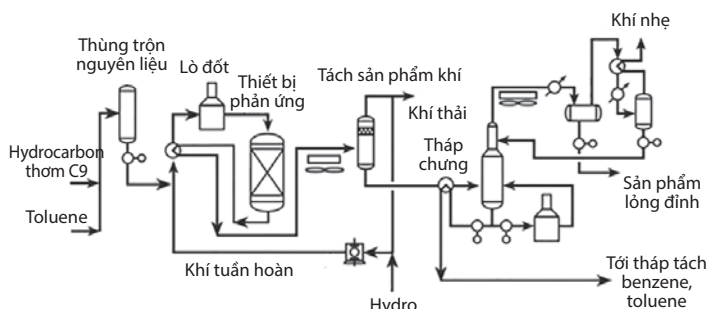
Tatoray là phân xưởng nằm trong tổ hợp aromatics, sử dụng công nghệ bản quyền của UOP. Phân xưởng này sử dụng xúc tác để transalkyl hóa các hydrocarbon thơm, đơn giản nhất là chuyển hóa toluene thành benzene và xylene hoặc chuyển hóa toluene và hỗn hợp C<sub>9</sub>/C<sub>10</sub> aromatics thành C<sub>6</sub> và C<sub>8</sub> aromatics [1] giúp tăng sản lượng benzene và C<sub>8</sub> aromatics từ các sản phẩm có giá trị thấp hơn là toluene và phân đoạn C<sub>9</sub>+ [2]. Như vậy, phân xưởng Tatoray thường được đặt giữa phân xưởng chưng cất tách xylene (lấy nguyên liệu A9/A10) và phân xưởng chưng cất tách benzene/toluene (chưng cất

sản phẩm và tuần hoàn nguyên liệu toluene). Hình 1 và 2 là sơ đồ công nghệ của một tổ hợp aromatics [3] và phân xưởng Tatoray điển hình của UOP [4].

Sơ đồ công nghệ của phân xưởng Tatoray khá đơn giản gồm: 1 cụm phản ứng và 1 cụm phân tách sản phẩm. Nguyên liệu đầu vào trước tiên được trộn lẫn với khí tuần hoàn giàu hydrogen, gia nhiệt sơ bộ bằng cách trao đổi nhiệt với dòng



Hình 1. Vị trí phân xưởng Tatoray trong tổ hợp aromatics điển hình



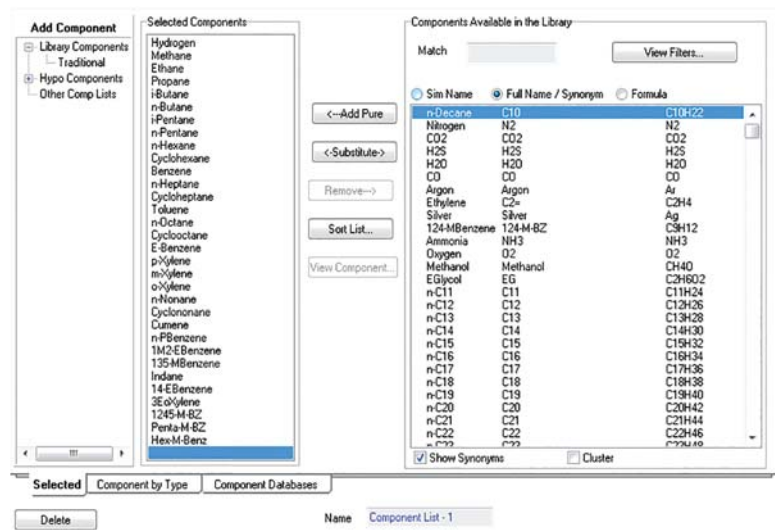
Hình 2. Sơ đồ công nghệ phân xưởng Tatoray điển hình

sản phẩm nóng từ thiết bị phản ứng, sau đó gia nhiệt lên đến nhiệt độ phản ứng ở lò đốt gia nhiệt nguyên liệu. Hỗn hợp nguyên liệu (ở thể hơi) được đưa vào thiết bị phản ứng theo hướng từ trên xuống, đi qua tầng xúc tác. Dòng sản phẩm đầu ra từ thiết bị phản ứng được làm nguội nhờ trao đổi nhiệt với dòng nguyên liệu hỗn hợp và thiết bị ngưng tụ sản phẩm, sau đó đưa vào bình tách sản phẩm. Từ đỉnh bình tách sản phẩm, dòng khí giàu hydrogen được kết hợp với dòng khí hydrogen bổ sung (makeup) và tuần hoàn lại thiết bị phản ứng nhờ máy nén khí tuần hoàn. Một phần dòng khí giàu hydrogen từ bình tách sản phẩm có thể được xả làm khí đốt để loại bỏ bớt các khí hydrocarbon nhẹ tích tụ khi cần. Dòng sản phẩm lỏng từ đáy bình tách sản phẩm được đưa vào tháp tách sản phẩm. Hơi từ đỉnh tháp tách sản phẩm được làm nguội và phân tách thành các sản phẩm lỏng và khí xả đưa đi làm khí đốt.

Tùy cấu hình cụ thể của từng tổ hợp aromatics mà cấu tử benzene được lấy ra theo sản phẩm ở đỉnh hoặc đáy tháp tách sản phẩm. Ở các thiết kế cũ, benzene được lấy ra từ đáy tháp tách sản phẩm cùng với xylene và toluene/C<sub>9</sub>+ aromatics chưa phản ứng. Dòng lỏng từ đáy tháp tách sản phẩm được đưa sang phân xưởng chưng cất tách benzene/toluene để thu hồi benzene sản phẩm, thu hồi toluene tuần hoàn lại phân xưởng Tatoray và C<sub>8</sub>+ aromatics đưa sang phân xưởng chưng cất tách xylene. Hơi từ đỉnh tháp tách sản phẩm được đưa vào tháp tách butane (debutanizer) ở phân xưởng Platforming để thu hồi benzene cuốn theo.

Trong các thiết kế mới đây của UOP, benzene được lấy ra cùng sản phẩm từ đỉnh tháp và đi qua phân xưởng chưng cất chiết (sulfolane) trước khi chưng cất lấy benzene nhằm tăng độ tinh khiết của benzene. Sản phẩm lỏng từ đáy tháp tách sản phẩm chủ yếu chứa C<sub>7</sub>+ aromatics được đưa vào tháp tách toluene ở phân xưởng chưng cất tách benzene/toluene như đã trình bày ở trên.

Nhiệt lượng để tái đun đáy tháp thường được tận dụng tối đa từ vùng đối lưu của lò đốt gia nhiệt nguyên liệu và từ nhiệt lượng dư



Hình 3. Các cấu tử mô phỏng

thừa ở phân xưởng chưng cất tách xylene (thông qua các thiết bị trao đổi nhiệt tái đun đáy tháp).

## 2. Mô phỏng phân xưởng Tatoray

### 2.1. Lựa chọn các cấu tử

Các cấu tử mô phỏng được chọn theo danh sách cấu tử như thiết kế và mô hình mô phỏng đào tạo vận hành phân xưởng Tatoray của UOP [5] (Hình 3).

### 2.2. Lựa chọn hệ nhiệt động

Nhóm tác giả sử dụng hệ nhiệt động 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 hydrocarbon (do đó hoạt động ổn định hơn hệ SRK khi mô phỏng ở trạng thái động).

Hệ nhiệt động Peng-Robinson tính toán chính xác các hệ thống 1 pha, 2 pha hoặc 3 pha với hiệu suất cũng như độ tin cậy cao và được sử dụng cho các dải điều kiện rất rộng:

- Nhiệt độ: > -271°C (-456°F);
- Áp suất: < 100.000kPa (15.000psia).

### 2.3. Thiết lập gói phản ứng

Gói phản ứng được thiết lập theo các phản ứng của mô hình động học trong mô hình mô phỏng đào tạo vận hành (OTS) của UOP [5], gồm 3 loại phản ứng là các phản ứng transalkyl hóa, các phản ứng hydrocracking và các phản ứng phụ (Bảng 1).

### 2.4. Thiết lập các dòng nguyên liệu

Theo cân bằng vật liệu thiết kế, nguyên liệu cho phân xưởng Tatoray là các dòng toluene (101) từ đỉnh tháp tách toluene của phân xưởng chưng cất tách benzene/toluene, dòng C<sub>9</sub>/C<sub>10</sub> aromatics (102) từ đỉnh tháp chưng cất aromatics nặng của phân xưởng chưng cất

**Bảng 1.** Thông số các phản ứng trong mô phỏng phân xưởng Tatoray

TT	Phản ứng	
1	<b>Transalkyl hóa</b>	Toluene → m-Xylene + Benzene
2		Toluene + 135-MBenzene → 2 m-Xylene
3		m-Xylene → o-Xylene + p-Xylene
4		m-Xylene → p-Xylene
5		EBZ → m-Xylene
6		1245-M-BZ → m-Xylene
7	<b>Hydrocracking</b>	H <sub>2</sub> + 3EoXylene → o-Xylene + Ethane
8		H <sub>2</sub> + n-PBenzene → Benzene + Propane
9		H <sub>2</sub> + Indane → Benzene + Propane
10		H <sub>2</sub> + Cumene → Benzene + Propane
11		H <sub>2</sub> + 14-EBZ → EBZ + Ethane + Benzene
12		H <sub>2</sub> + 1M2-EBZ → Toluene + Ethane
13		H <sub>2</sub> + Cyclooctane → Methane + Propane
14		H <sub>2</sub> + 1245-M-BZ → n-Pentane + i-Pentane
15		H <sub>2</sub> + Cyclononane → CycloHexane + Propane
16		H <sub>2</sub> + 1245-M-BZ → n-Butane + i-Butane + Ethane + Propane
17		H <sub>2</sub> + n-Nonane → n-Hexane + Propane
18		H <sub>2</sub> + n-Heptane → Methane
19		H <sub>2</sub> + 1245-M-BZ → Cyclohexane + Methane
20	<b>Phản ứng phụ</b>	1245-M-BZ → penta-M-BZ
21		Indane → Cyclononane
22		Benzene + Ethane → m-Xylene
23		Benzene → Propane + i-Butane
24		Propane + i-Butane → Cycloheptane + H <sub>2</sub>

tách xylene và dòng hydrogen bổ sung (180) từ phân xưởng nén và phân phối hydrogen (Bảng 2).

**2.5. Thiết lập các thiết bị**

Các thiết bị chính và ký hiệu trong phân xưởng Tatoray (Bảng 3).

Thông số cần thiết để mô phỏng [6 - 8] của các thiết bị này được lấy từ bảng dữ liệu (data sheet) của nhà cung cấp thiết bị.

**2.6. Thiết lập các vòng điều khiển**

Sơ đồ mô phỏng động phân xưởng Tatoray gồm 16 vòng/cụm vòng điều khiển cho các thông số cần điều khiển của phân xưởng (Hình 4). Các thông số cần thiết của van, thiết bị đo/điều khiển để mô phỏng các vòng điều khiển [9 - 11] cũng được lấy từ số liệu thiết kế và data sheet của nhà cung cấp thiết bị.

**3. Kết quả và thảo luận**

**3.1. Sơ đồ mô phỏng phân xưởng Tatoray**

Sơ đồ mô phỏng động phân xưởng Tatoray của UOP được thể hiện như Hình 4.

Sơ đồ mô phỏng này thể hiện thông số cơ bản cần thiết [7] của các vòng điều khiển, các thiết bị và các dòng công nghệ chính của phân xưởng Tatoray.

**3.2. Biểu đồ thông số hoạt động của một số thiết bị quay và vòng điều khiển**

Hình 5 - 8 thể hiện thông số hoạt động của máy nén khí tuần hoàn K-101 và một số vòng điều khiển.

Hình 5 và 6 cho thấy máy nén K-101 đang hoạt động ở khoảng lưu lượng an toàn và hiệu suất xấp xỉ tối đa theo thiết kế. Như vậy, thiết bị này đang hoạt động với hiệu quả cao nhất, nghĩa là năng lượng tiêu thụ đang ở mức tối ưu và nguy cơ hỏng hóc thiết bị là thấp nhất. Hình 7 và 8 cho thấy các vòng điều khiển đều hoạt động ở trạng thái ổn định theo thời gian với các giá trị PV dao động rất ít hoặc không dao động quanh giá trị SP và các giá trị OP (cũng là độ mở van) đều nằm trong khoảng làm việc bình thường của các van điều khiển (10 - 80%). Như vậy, các thông số công nghệ đều được giữ ổn định ở giá trị yêu cầu.

**3.3. So sánh kết quả mô phỏng với số liệu thiết kế**

**3.3.1. So sánh thông số cơ bản của các dòng công nghệ chính**

Các thông số nhiệt độ, áp suất và lưu lượng của các dòng công nghệ chính trong phân xưởng Tatoray theo mô phỏng được so sánh với số liệu thiết kế như Bảng 4.

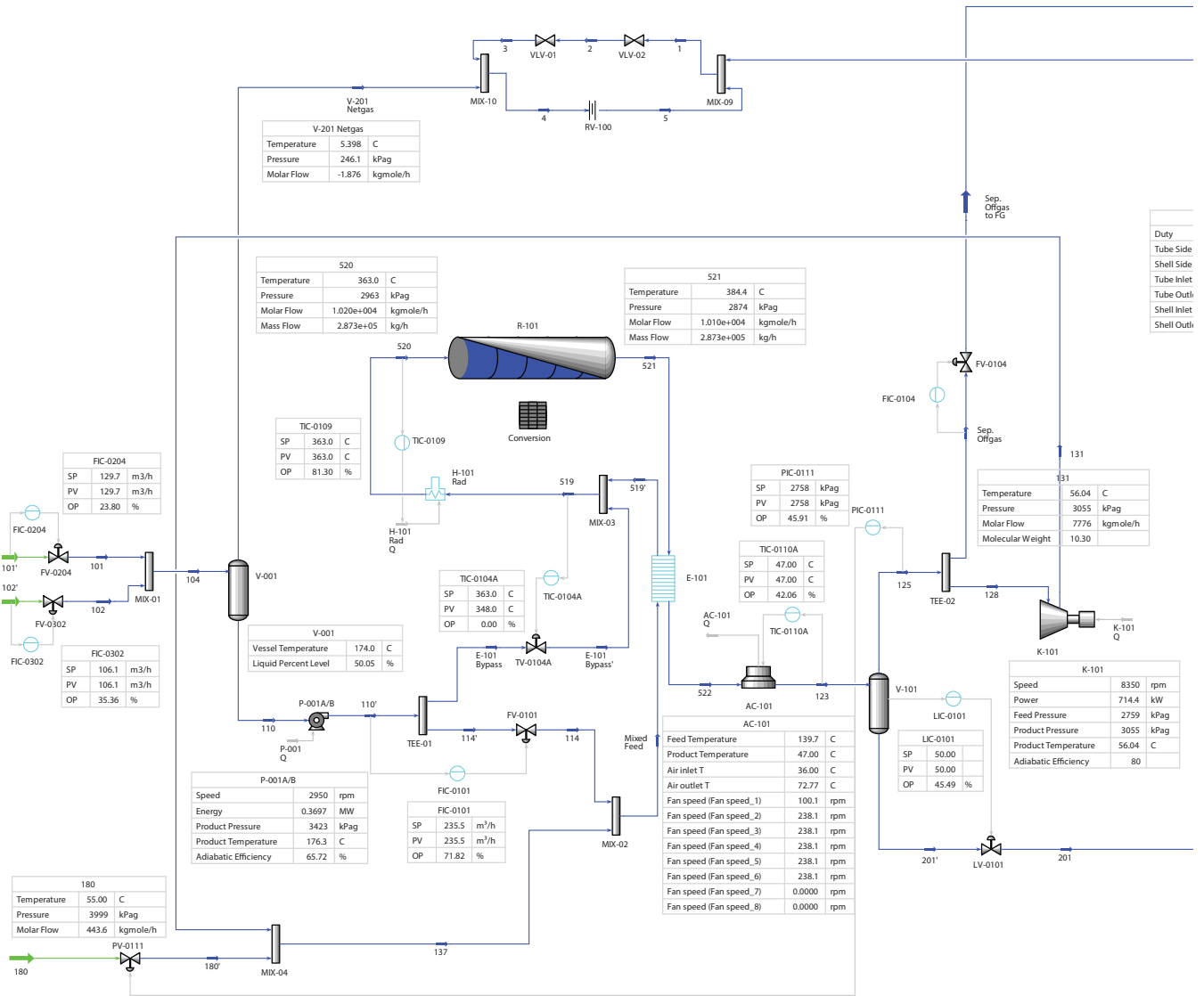
Theo Bảng 4, một số thông số mô phỏng có sai số tương đối lớn so với thiết kế (> 5%). Tuy nhiên, đây là các

**Bảng 2. Thông số các dòng nguyên liệu**

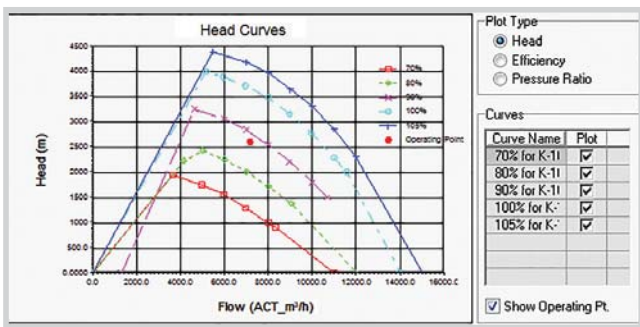
Thông số	Đơn vị	Dòng 101	Dòng 102	Dòng 180
Nhiệt độ	°C	172	177	55
Áp suất	kPag	374	371	3.999
<b>Thành phần</b>				
Hydrogen	kmol/giờ	0	0	444,12
Methane	kmol/giờ	0	0	0,44
Ethane	kmol/giờ	0	0	0
Propane	kmol/giờ	0	0	0
i-Butane	kmol/giờ	0	0	0
n-Butane	kmol/giờ	0	0	0
i-Pentane	kmol/giờ	0	0	0
n-Pentane	kmol/giờ	0	0	0
n-Hexane	kmol/giờ	0	0	0
Cyclohexane	kmol/giờ	0,0084	0	0
Benzene	kmol/giờ	4,81	0	0
n-Heptane	kmol/giờ	0,0003	0	0
Cycloheptane	kmol/giờ	0,18	0	0
Toluene	kmol/giờ	1.224,85	0	0
n-Octane	kmol/giờ	0,12	0	0
Cyclooctane	kmol/giờ	0,041	0	0
E-Benzene	kmol/giờ	0,035	0	0
p-Xylene	kmol/giờ	0,15	0	0
m-Xylene	kmol/giờ	0,34	0	0
o-Xylene	kmol/giờ	0	8,95	0
n-Nonane	kmol/giờ	0	0,029	0
Cyclononane	kmol/giờ	0	0,0091	0
Cumene	kmol/giờ	0	5,07	0
n-PBenzene	kmol/giờ	0	17,56	0
1M2-EBenzene	kmol/giờ	0	109,38	0
135-MBenzene	kmol/giờ	0	373,08	0
Indane	kmol/giờ	0	8,34	0
14-EBenzene	kmol/giờ	0	79,7	0
3EoXylene	kmol/giờ	0	80,61	0
1245-M-BZ	kmol/giờ	0	60,68	0
Penta-M-BZ	kmol/giờ	0	2,81	0
Hex-M-Benz	kmol/giờ	0	2,2	0
Tổng	kmol/giờ	1.230,5347	748,4181	444,56

**Bảng 3. Các thiết bị chính của phân xưởng Tatoray**

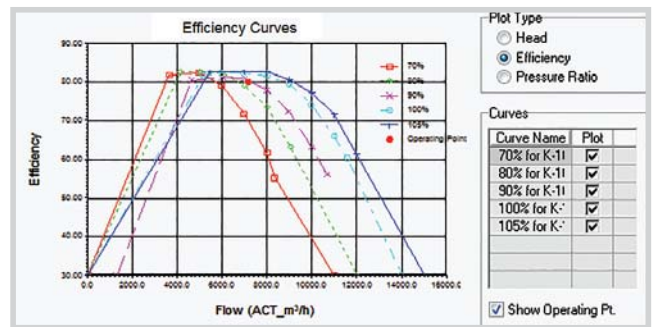
Thiết bị	Tên ký hiệu
Bồn chứa nguyên liệu	V-001
Bơm nguyên liệu	P-001A/B
Thiết bị trao đổi nhiệt nguyên liệu - sản phẩm	E-101
Lò gia nhiệt nguyên liệu	H-101
Thiết bị phản ứng	R-101
Thiết bị ngưng tụ sản phẩm	AC-101
Bình tách sản phẩm	V-101
Máy nén khí tuần hoàn	K-101
Thiết bị trao đổi nhiệt nguyên liệu - sản phẩm đáy tháp tách	E-202
Tháp tách sản phẩm	C-201
Thiết bị tái đun đáy tháp tách	E-205A/B
Thiết bị trao đổi nhiệt nguyên liệu - sản phẩm đỉnh tháp tách	E-201
Thiết bị ngưng tụ đỉnh tháp tách	AC-201
Bình chứa đỉnh tháp tách	V-201
Thiết bị làm lạnh khí xả tháp tách	E-204
Bơm đỉnh tháp tách	P-201A/B
Bơm đáy tháp tách	P-202A/B



Hình 4. Sơ đồ mô phỏng động phân xưởng Tatorox



Hình 5. Đường đặc tính áp suất tĩnh của máy nén K-101



Hình 6. Đường đặc tính hiệu suất của máy nén K-101

thông số không quan trọng và không ảnh hưởng đến chất lượng của mô hình mô phỏng.

### 3.3.2. So sánh thành phần sản phẩm phản ứng và độ chuyển hóa

Thành phần các cấu tử chính trong dòng nguyên liệu

(520), sản phẩm (521) của thiết bị phản ứng và độ chuyển hóa được thể hiện ở Bảng 5 và Hình 9.

Các thông số của hệ phản ứng mô phỏng, đặc biệt là các thông số quan trọng, gần giống với số liệu thiết kế. Sở dĩ có sự khác nhau là do mô hình nhiệt động sử dụng để mô phỏng là mô hình dành cho đào tạo vận hành, còn



Bảng 4. So sánh thông số mô phỏng và thiết kế của các dòng công nghệ chính

Tên dòng	Nhiệt độ (°C)			Áp suất (kPag)			Lưu lượng (kmol/giờ)		
	Thiết kế	Mô phỏng	Sai số (%)	Thiết kế	Mô phỏng	Sai số (%)	Thiết kế	Mô phỏng	Sai số (%)
101	172	172	0,00	374	356,9	4,57	1231	1.230	0,04
102	177	177	0,00	371	356,8	3,83	748,4	748,4	0,00
114	174	176,4	1,38	3.215	3.050	5,13	1.979	1.980	0,05
123	47	47	0,02	2.771	2.753	0,65	10.092	10.090	0,02
125	47	47	0,11	2.758	2.758	0,00	7.776	7.776	0,00
128	47	47	0,11	2.756	2.759	0,11	7.776	7.776	0,00
131	57	56	1,68	3.092	3.055	1,20	7.776	7.776	0,00
137	57	55,8	2,05	3.076	3.055	0,68	8.220	8.218	0,03
180	55	55	0,00	3.999	3.999	0,00	444,6	443,6	0,22
201	46	46,9	1,85	817	780,9	4,42	2.317	2.320	0,14
202	116	116,4	0,34	747	712,0	4,69	2.317	2.320	0,14
204	160	160,3	0,19	671	677,7	1,00	2.317	2.320	0,14
209	141	140,8	0,14	654	654,0	0,00	1.909	1.875	1,80
210	115	115,3	0,26	629	633,3	0,68	1.909	1.875	1,80
211	47	46,9	0,23	606	609,2	0,53	1.909	1.875	1,80
213	47	46,5	1,02	603	623,0	3,32	336,1	316,1	5,96
215	9	9	0,20	519	519,0	0,00	291,3	280,2	3,82
220	47	46,4	1,38	603	631,4	4,71	1.573	1.591	1,13
225	47	47	0,02	1.072	1.030	3,92	1.263	1.266	0,25
234	47	47,1	0,30	631	631	0,00	310,3	325	4,73
242	224	225	0,45	752	756,6	0,61	6.887	6.887	0,01
250	224	225,7	0,76	1.503	1.408	6,32	1.556	1.554	0,14
253	227	227	0,00	728	716	1,65	1.556	1.554	0,14
259	224	225	0,45	752	756,6	0,61	3.271	3.261	0,31
261	224	225,7	0,76	1.503	1.408	6,32	1.715	1.719	0,23
271	162	165,9	2,41	1.058	1.058	0,00	1.715	1.719	0,23
519	348	348	0,00	3.001	3.001	0,00	10.199	10.200	0,01
520	363	363	0,00	2.963	2.963	0,00	10.199	10.200	0,01
521	380	384,4	1,16	2.874	2.874	0,00	10.092	10.100	0,08
522	133	139,7	5,04	2.816	2.816	0,00	10.092	10.100	0,08

Bảng 5. So sánh thành phần các cấu tử chính trong dòng nguyên liệu, sản phẩm phản ứng và độ chuyển hóa

Cấu tử	Dòng 520 (kmol/giờ)			Dòng 521 (kmol/giờ)		
	Thiết kế	Mô phỏng	Sai số (%)	Thiết kế	Mô phỏng	Sai số (%)
Hydrogen	<b>5.936,8</b>	<b>6.087,3</b>	2,53	<b>5.513,6</b>	<b>5.665,7</b>	2,76
Methane	109,6	115,1	5,01	111,9	117,3	4,81
Ethane	1.892,7	1.752,4	-7,41	2.099,9	1.961,5	-6,59
Propane	162,0	166,6	2,85	219,6	225,0	2,47
Benzene	<b>19,1</b>	<b>18,3</b>	-4,29	<b>254,9</b>	<b>251,4</b>	-1,39
Toluene	<b>1.242,2</b>	<b>1.240,2</b>	-0,16	<b>826,1</b>	<b>836,0</b>	1,19
p-Xylene	<b>1,4</b>	<b>1,1</b>	-17,56	<b>152,4</b>	<b>143,6</b>	-5,77
m-Xylene	<b>3,0</b>	<b>2,6</b>	-10,73	<b>337,2</b>	<b>335,3</b>	-0,55
o-Xylene	<b>9,8</b>	<b>9,8</b>	-0,70	<b>140,5</b>	<b>134,9</b>	-3,98
n-PBenzene	17,6	17,6	-0,03	0,1	0,1	5,36
1M2-EBenzene	109,4	109,4	-0,02	11,7	12,6	7,60
135-MBenzene	373,7	373,5	-0,05	216,0	218,7	1,28
14-EBenzene	79,7	79,7	-0,02	1,3	1,5	14,91
3EoXylene	80,6	80,6	-0,02	8,9	9,5	6,37
1245-M-BZ	60,7	60,7	-0,03	21,9	22,6	3,49
Toluene+C <sub>9</sub> <sup>+</sup> A	1.963,9	1.961,6	-0,11	1.085,9	1.101,0	1,38
<b>Độ chuyển hóa (% mol)</b>						
Thiết kế	<b>44,70</b>					
Mô phỏng	<b>43,88</b>					

Bảng 6. So sánh chỉ tiêu cơ bản của các dòng sản phẩm

Chỉ tiêu	Dòng offgas (215)			Sản phẩm ở đỉnh tháp (234)			Sản phẩm ở đáy tháp (271)		
	Thiết kế	Mô phỏng	Sai số (%)	Thiết kế	Mô phỏng	Sai số (%)	Thiết kế	Mô phỏng	Sai số (%)
Nhiệt độ (°C)	9	9,029	0,32	47	47,21	0,45	162	166,1	2,53
Áp suất (kPag)	519	519	0,00	631	631	0,00	1058	1058	0,00
Lưu lượng (kmol/giờ)	291,34	281,10	-3,82	310,31	325,0	4,73	1715,1	1719,0	0,23
Hàm lượng benzene (%mol)	<b>0,52</b>	<b>0,56</b>	7,69	75,52	72,24	-4,35	<b>0,28</b>	<b>0,10</b>	-64,34
Hàm lượng toluene (%mol)	0,00	0,00	0,00	<b>1,30</b>	<b>1,30</b>	0,00	46,92	47,59	1,41

	A	B	C	D
1	Cầu tu	Dòng 520	Dòng 521	Do chuyển hóa
2	Toluene	1240.2273 kgmole/h	835.9512 kgmole/h	
3	n-PBenzene	17.5579 kgmole/h	0.1158 kgmole/h	
4	1M2-EBenzene	109.4105 kgmole/h	12.5540 kgmole/h	
5	135-MBenzene	373.5637 kgmole/h	218.7607 kgmole/h	
6	14-EBenzene	79.6977 kgmole/h	1.4698 kgmole/h	
7	3E-oxylene	80.6175 kgmole/h	9.4967 kgmole/h	
8	1245-M-B2	60.6950 kgmole/h	22.6130 kgmole/h	
9	Tong	1961.7758 kgmole/h	1100.9614 kgmole/h	43.88

Hình 9. Độ chuyển hóa theo mô phỏng của phân xưởng Tatoray

Inlet Material Streams	Counted	Values	Outlet Material Streams	Counted	Values
102'	✓	9.307e+004 kg.	271	✓	1.750e+005 kg.
180	✓	900.4 kg/h	234	✓	2.232e+004 kg.
101'	✓	1.133e+005 kg.	264 (U-044)	✓	6.271e+005 kg.
261 (U-044)	✓	6.271e+005 kg.	215	✓	9211 kg/h

Total of Inlet Streams: 2.073e+005 kg/h  
 Total of Outlet Streams: 2.071e+005 kg/h  
 Imbalance = (Total of Outlet Streams) - (Total of Inlet Streams) = -168.8 kg/h  
 Relative Imbalance (%) = Imbalance / (Total of Inlet Streams) \* 100% = -0.08%

Hình 10. Kết quả tính cân bằng vật chất

Inlet Streams	Counted	Values	Outlet Streams	Counted	Values
102'	✓	-5363 kW	AC-101 Q	✓	2.367e+004 kW
E-204 Q	✓	394.4 kW	AC-201 Q	✓	8105 kW
H-101 Conv Q	✓	3604 kW	271	✓	6720 kW
047-H-101 Rad Q	✓	3617 kW	234	✓	405.4 kW
K-101 Q	✓	714.2 kW	264 (U-044)	✓	669.2 kW
P-001 Q	✓	363.6 kW	215	✓	-6689 kW
P-201 Q	✓	44.35 kW			
P-202 Q	✓	136.2 kW			
180	✓	96.86 kW			
101'	✓	1.320e+004 kW			
261 (U-044)	✓	1.745e+004 kW			

Total of Inlet Streams: 3.427e+004 kW  
 Total of Outlet Streams: 3.288e+004 kW  
 Imbalance = (Total of Outlet Streams) - (Total of Inlet Streams) = -1386 kW  
 Relative Imbalance (%) = Imbalance / (Total of Inlet Streams) \* 100% = -4.04%

Hình 11. Kết quả tính cân bằng năng lượng

### 3.4. Cân bằng vật chất và năng lượng

#### 3.4.1. Cân bằng vật chất

Với mô hình mô phỏng các dòng vào là 101', 102' và 180, các dòng ra là 215, 234 và 271. Nhóm tác giả sử dụng công cụ Property Balance Utility để tính toán cân bằng vật chất (Hình 10).

Theo Hình 10, sai số tương đối rất nhỏ (chỉ khoảng 0,08%), cho thấy hệ mô phỏng đang vận hành rất ổn định do mô phỏng động còn 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

Nhóm tác giả sử dụng công cụ Property Balance Utility tính toán cân bằng năng lượng theo tổng các dòng năng lượng đầu vào và đầu ra (Hình 11).

Hình 11 cho thấy sai số cân bằng năng lượng là 4,04%. Sai số này do nghiên cứu có mô phỏng thất thoát nhiệt ra môi trường của một số thiết bị quan trọng để sát với thực tế, mà sự thất thoát này lại không được tính toán bởi công cụ Property Balance Utility.

### 3.5. Tối ưu hóa

Có nhiều giải pháp để tối ưu hóa quá trình vận hành của các nhà máy lọc hóa dầu như: tối ưu kế hoạch sản xuất, kế hoạch bảo dưỡng; lựa chọn nguyên liệu, hóa phẩm cho lợi ích cao nhất; tiết kiệm năng lượng và nâng công suất chế biến. Nhóm tác giả chỉ nghiên cứu về tối ưu hóa năng lượng tiêu thụ ở cụm chưng cất tách sản phẩm.

#### 3.5.1. Phương pháp thực hiện

Phương pháp tối ưu hóa được nhóm tác giả sử dụng trong nghiên cứu này là tiến hành thay đổi các thông số vận hành của cụm phân xưởng trên mô hình mô phỏng, sao cho năng lượng tiêu thụ thấp nhất mà các dòng sản phẩm vẫn đảm bảo chỉ tiêu.

Đối với cụm chưng cất tách sản phẩm ở phân xưởng Tatoray của UOP, các chỉ tiêu quan trọng là hàm lượng

toluene trong sản phẩm đỉnh tháp (dòng 234) và hàm lượng benzene trong sản phẩm đáy tháp (dòng 271). Theo thiết kế, 2 chỉ tiêu này có giá trị lần lượt là 1,3%mol toluene và 0,28%mol benzene (Bảng 6).

Năng lượng tiêu thụ trong cụm chưng cất tách sản phẩm gồm:

- Năng lượng cấp cho 2 thiết bị trao đổi nhiệt tái đun đáy tháp E-205A/B;
- Năng lượng cấp từ buồng đối lưu của lò gia nhiệt H-101 để tái đun đáy tháp;
- Năng lượng tiêu thụ ở quạt làm mát đỉnh tháp AC-201;
- Năng lượng tiêu thụ để làm lạnh ở thiết bị E-204;
- Năng lượng tiêu thụ ở các bơm P-201A/B và P-202A/B.

Trong đó, dòng năng lượng cấp từ buồng đối lưu của lò gia nhiệt H-101 để tái đun đáy tháp được giữ không đổi, do trên thực tế công suất của lò gia nhiệt được điều khiển ở cụm phản ứng, các dòng năng lượng còn lại sẽ thay đổi khi thông số vận hành của cụm thay đổi.

Các trường hợp được nghiên cứu như sau:

- Trường hợp chuẩn: Các dòng năng lượng cấp vào tháp như thiết kế, nhiệt độ đĩa nhạy cảm được điều chỉnh để chỉ tiêu sản phẩm đỉnh tháp đạt tiêu chuẩn thiết kế (chỉ tiêu sản phẩm đáy tháp tốt hơn thiết kế).
- Trường hợp 1: Từ trường hợp chuẩn, giảm năng lượng cấp vào tháp bằng cách giảm dòng cấp nhiệt từ phân xưởng chưng cất tách xylene (dùng các bộ điều khiển FIC-0202 và FIC-0203 điều khiển lưu lượng dòng 261 (XYF)), điều chỉnh nhiệt độ đĩa nhạy cảm để chỉ tiêu sản phẩm đỉnh tháp đạt tiêu chuẩn thiết kế (chỉ tiêu sản phẩm đáy tháp vẫn tốt hơn thiết kế);
- Trường hợp 2: Tiếp tục giảm năng lượng cấp vào tháp để chỉ tiêu sản phẩm đáy tháp đạt tiêu chuẩn thiết kế, điều chỉnh nhiệt độ đĩa nhạy cảm để chỉ tiêu sản phẩm đỉnh tháp đạt tiêu chuẩn thiết kế;
- Trường hợp 3: Tiếp tục giảm năng lượng cấp vào tháp để hàm lượng benzene trong sản phẩm đáy tháp đạt 0,4%mol, điều chỉnh nhiệt độ đĩa nhạy cảm để hàm lượng toluene trong sản phẩm đỉnh tháp đạt 1,7%mol;

**Bảng 7.** Kết quả nghiên cứu các giải pháp tối ưu hóa vận hành cụm tháp chưng cất

Thông số	Thiết kế	Trường hợp chuẩn	Trường hợp 1	Trường hợp 2	Trường hợp 3	Trường hợp 4
FIC-0202/0203 SP (m <sup>3</sup> /giờ)	357,4	357,4	<b>350</b>	<b>339</b>	<b>331</b>	<b>325,9</b>
<b>Nhiệt độ (°C)</b>						
Đĩa nhạy cảm (đĩa 10)	-	<b>169,9</b>	<b>169,6</b>	<b>169,3</b>	<b>170,8</b>	<b>171,6</b>
Dòng offgas	9	9,029	9,015	9,017	9,033	9,002
Sản phẩm đỉnh tháp	47	47,21	47,16	47,12	47,27	47,21
Sản phẩm đáy tháp	162	166,1	165,6	165,4	165,3	165,0
<b>Chỉ tiêu (% mol)</b>						
Benzene trong offgas	0,52	0,56	0,56	0,56	0,56	0,56
Toluene trong sản phẩm đỉnh tháp	1,30	<b>1,30</b>	<b>1,30</b>	<b>1,30</b>	<b>1,70</b>	<b>2,00</b>
Benzene trong sản phẩm đáy tháp	0,28	0,10	0,15	<b>0,28</b>	<b>0,40</b>	<b>0,50</b>
<b>Lưu lượng các sản phẩm (kmol/giờ)</b>						
Dòng offgas	291,3	280,2	281,0	281,3	280,1	281,7
Sản phẩm đỉnh tháp	310,3	325	324,4	321,3	319,9	319,1
Sản phẩm đáy tháp	1715,1	1719,0	1713,0	1716,0	1716,0	1718,0
<b>Năng lượng tiêu thụ (MW)</b>						
E-205A/B	18,971	16,780	16,566	16,276	16,042	15,900
H-101-Convection	1,964	3,606	3,606	3,606	3,606	3,606
AC-201	8,591	8,098	7,884	7,682	7,559	7,320
E-204	0,502	0,393	0,392	0,394	0,399	0,396
P201A/B	0,056	0,044	0,044	0,044	0,044	0,043
P202A/B	0,189	0,136	0,136	0,136	0,136	0,136
Tổng năng lượng tiêu thụ	30,274	29,058	28,628	28,138	27,786	27,401
Giảm so với trường hợp chuẩn	-	-	0,430	0,920	1,272	1,657
<b>Giá trị tiết kiệm USD (theo đơn giá 0,195USD/kW)*</b>						
Tính theo giờ vận hành	-	-	84	179	248	323
Tính theo năm vận hành (8.320 giờ)	-	-	697.129	<b>1.492.835</b>	2.063.385	<b>2.687.554</b>

(\*) là giá trị ví dụ, được tính toán từ giá nhiên liệu tiêu thụ để sản xuất năng lượng trong nhà máy lọc dầu

- Trường hợp 4: Tiếp tục giảm năng lượng cấp vào tháp để hàm lượng benzene trong sản phẩm đáy tháp đạt 0,5%mol, điều chỉnh nhiệt độ đĩa nhạy cảm để hàm lượng toluene trong sản phẩm đỉnh tháp đạt 2,0%mol.

3.5.2. Kết quả

Tổng hợp kết quả tối ưu hóa được thể hiện ở Bảng 7.

Ở trường hợp 2, các chỉ tiêu sản phẩm đạt yêu cầu theo thiết kế và quy đổi giá trị năng lượng tiết kiệm được là 1.492.835USD/năm. Giả sử các phân xưởng khác trong tổ hợp aromatics cũng được điều chỉnh để có thể chấp nhận chỉ tiêu sản phẩm phân xưởng Tatoray giảm xuống còn 2%mol toluene trong sản phẩm đỉnh tháp và 0,5%mol benzene trong sản phẩm đáy tháp (trường hợp 4), giá trị năng lượng tiết kiệm được có thể lên đến 2.687.554USD/năm.

**3.6. Xử lý một số vấn đề thường gặp trong quá trình vận hành**

3.6.1. Sự giảm hoạt tính xúc tác

Sự giảm hoạt tính xúc tác có thể được giả định bằng cách giảm hằng số tốc độ chiều thuận của các phản ứng, cụ thể là giảm hệ số A trong các phương trình Arrhenius. Hệ số A trong các phương trình phản ứng động học này đặc trưng cho tần suất và chiều hướng va chạm của các phân tử nên hệ số A quyết định tốc độ phản ứng ở giá trị nhiệt độ nhất định.

Cách tiến hành ở nghiên cứu này là hệ số A của các phản ứng được giảm dần, đồng thời nhiệt độ phản ứng được tăng dần (để vẫn đảm bảo độ chuyển hóa 43,88%) đến khi nhiệt độ đầu vào phản ứng đạt giá trị thiết kế ở cuối chu kỳ làm việc của xúc tác (EOR) là 482°C. Kết quả thu được thể hiện ở Bảng 8.

Trong quá trình vận hành phân xưởng, khi có số liệu thực tế của thành phần sản phẩm và độ chuyển hóa, phương pháp phân tích sự giảm hoạt tính xúc tác có thể

được áp dụng để xác định giá trị nhiệt độ đầu vào phản ứng cần điều chỉnh và đánh giá thành phần sản phẩm, độ chuyển hóa... trước khi áp dụng thực tế. Ngoài ra, có thể đánh giá tốc độ giảm hoạt tính xúc tác, từ đó xác định tuổi thọ xúc tác. Giả sử trong quá trình vận hành, để đảm bảo độ chuyển hóa cần tăng nhiệt độ đầu vào thiết bị phản ứng trung bình 2°C/tháng. Như vậy, với thiết kế của phân xưởng (nhiệt độ bắt đầu và cuối chu kỳ làm việc của xúc tác (SOR và EOR) lần lượt là 363°C và 482°C) sau khoảng 5 năm sẽ phải dừng phân xưởng để tái sinh hoặc thay thế chất xúc tác.

3.6.2. Sự giảm hiệu suất thiết bị trao đổi nhiệt

Phần mềm Unisim Design cung cấp 4 lựa chọn mô phỏng sự cố đối với thiết bị trao đổi nhiệt dạng shell-tube bao gồm:

- Giảm hiệu suất làm việc (performance deterioration);
- Tắc nghẽn shell (shell fouling);
- Tắc nghẽn ống (tube fouling);
- Rò rỉ ống (tube leakage).

Để đơn giản nhóm tác giả chỉ mô phỏng một trường hợp là sự giảm hiệu suất làm việc của thiết bị trao đổi nhiệt tái đun đáy tháp E-205A (Hình12) với thông số như Bảng 9.

Khi kích hoạt sự cố, hiệu suất trao đổi nhiệt của thiết bị sẽ giảm làm cho nhiệt độ dòng tái đun ở đáy tháp 248A giảm, đồng nghĩa khả năng phân tách của tháp chưng cất giảm làm cho hàm lượng benzene trong sản phẩm ở đáy tháp (dòng 271) tăng lên, cụ thể như ở Hình 13 (thời điểm nhiệt độ dòng 248A giảm đột ngột từ trạng thái ổn định 227,7°C là thời điểm bắt đầu sự cố).

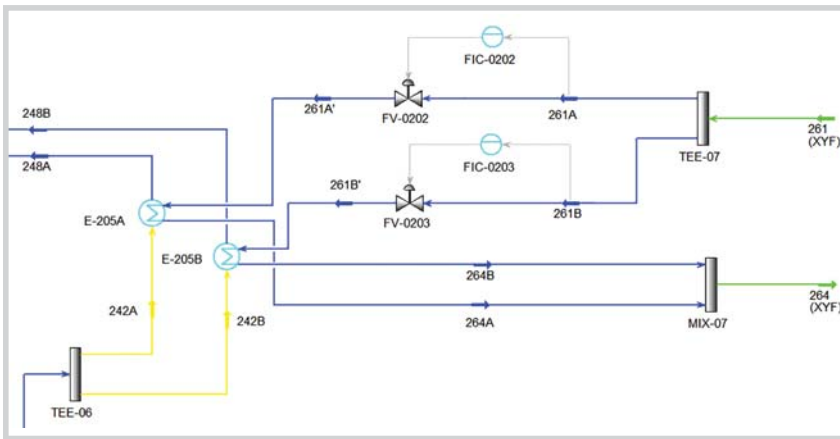
Có nhiều phương án để khắc phục sự cố này, nhưng phương án tăng lưu lượng dòng cấp nhiệt 261B từ phân xưởng chưng cất tách xylene cho thiết bị trao đổi nhiệt E-205B (dùng bộ điều khiển FIC-0203) được chọn nhằm

**Bảng 8.** Kết quả mô phỏng sự giảm hoạt tính xúc tác

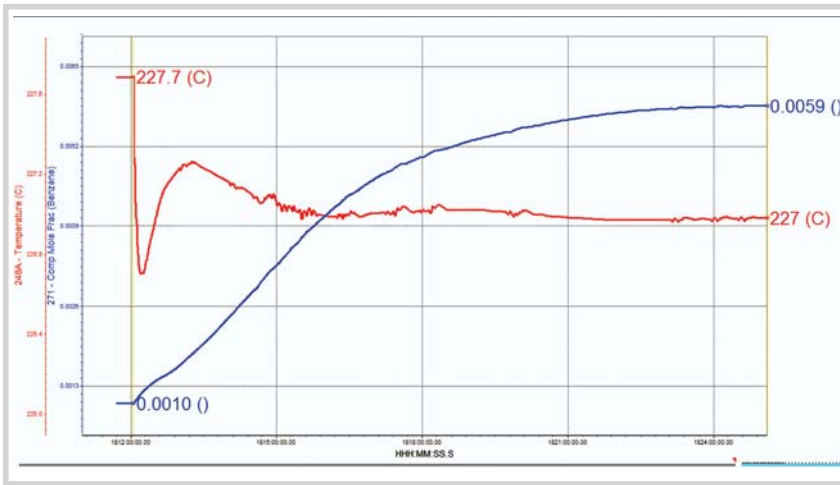
Hệ số A	A	80%A	50%A	30%A	20%A	15,5%A
Nhiệt độ đầu vào phản ứng (°C)	363	375,8	403,6	436,2	463,8	482

**Bảng 9.** Thông số mô phỏng sự giảm hiệu suất thiết bị trao đổi nhiệt

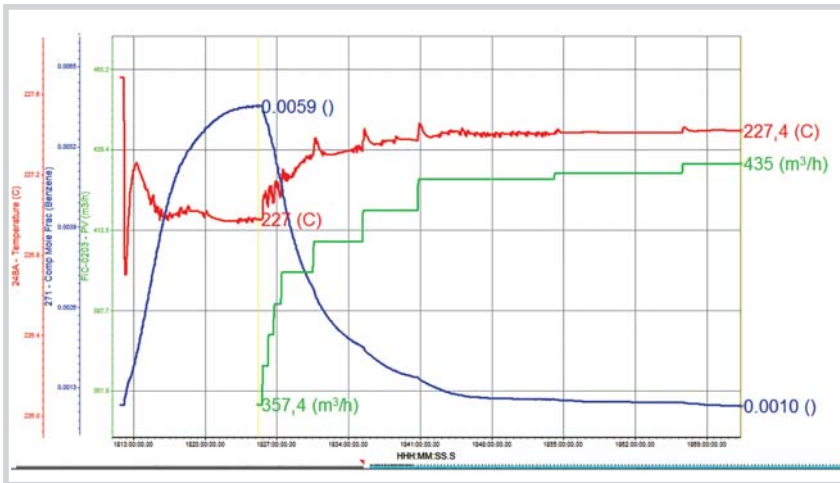
Thông số	Giá trị
Thiết bị	E-205A
Loại sự cố	Giảm hiệu suất làm việc
Mức độ giảm (%)	80
Thời gian trễ (giây)	10
Thời gian thay đổi (giây)	30



Hình 12. Sơ đồ cụm thiết bị trao đổi nhiệt tại đùn đáy tháp tách sản phẩm



Hình 13. Thay đổi nhiệt độ dòng tái đun đáy tháp và hàm lượng benzene trong sản phẩm đáy khí xảy ra sự cố giảm hiệu suất trao đổi nhiệt



Hình 14. Biểu đồ các thông số khi khắc phục sự cố giảm hiệu suất trao đổi nhiệt

Bảng 10. Tổng hợp số liệu mô phỏng sự giảm hiệu suất thiết bị trao đổi nhiệt

Thông số	Trước sự cố	Trong sự cố	Sau xử lý
Nhiệt độ dòng 248A (°C)	227,7	227	227,4
Lưu lượng dòng 261B (m <sup>3</sup> /giờ)	357,4	357,4	435
Hàm lượng benzene trong sản phẩm đáy tháp (phần mol)	0,001	0,0059	0,001

bổ sung lượng nhiệt thiếu hụt cho tháp để chỉ tiêu sản phẩm đáy tháp đạt lại như trước khi xảy ra sự cố (hàm lượng benzene là 0,001 phần mol). Giá trị điều chỉnh và kết quả khắc phục được thể hiện ở Hình 14 và Bảng 10.

Trước khi tăng lưu lượng dòng 261B nhiệt độ dòng 248A là 227°C và hàm lượng benzene trong sản phẩm đáy tháp là 0,0059 phần mol. Khi tăng dần lưu lượng dòng 261B nhiệt độ dòng 248A tăng dần và hàm lượng benzene trong sản phẩm đáy giảm dần. Khi lưu lượng dòng 261B tăng đến 435m<sup>3</sup>/giờ hàm lượng benzene trong sản phẩm đáy tháp trở về giá trị như trước khi xảy ra sự cố là 0,001 phần mol.

Phương án đề xuất tăng lưu lượng dòng cấp nhiệt 261B từ phân xưởng chưng cất tách xylene cho thiết bị trao đổi nhiệt E-205B chỉ là phương án xử lý thuần túy theo kỹ thuật. Trên thực tế, việc lựa chọn thay đổi các thông số vận hành hay dừng thiết bị để bảo dưỡng còn phụ thuộc vào các đánh giá chi phí năng lượng phụ trội, chi phí bảo dưỡng thiết bị...

#### 4. Kết luận

Nghiên cứu đã mô phỏng thành công phân xưởng Tatoray bằng phần mềm Unisim Design. Kết quả mô phỏng thu được khá phù hợp với số liệu thiết kế của UOP (thông số cơ bản của các dòng công nghệ chính, thành phần sản phẩm phản ứng và độ chuyển hóa, chỉ tiêu các sản phẩm của phân xưởng).

Trạng thái mô phỏng động của mô hình có độ ổn định vận hành rất cao thể hiện ở các thông số điều khiển của các vòng điều khiển rất ổn định theo thời gian.

Kết quả nghiên cứu tối ưu hóa vận hành cụm chưng cất sản phẩm cho thấy chi phí năng lượng tiết kiệm được rất lớn và có thể áp dụng được vào thực tế sản xuất. Nhóm tác giả đã mô phỏng sự giảm hoạt tính xúc tác; đề xuất phương pháp giám sát, đánh giá tuổi thọ xúc tác; mô phỏng sự giảm hiệu suất của thiết bị trao đổi nhiệt tái đun đáy tháp chưng cất và biện pháp khắc phục.

#### Tài liệu tham khảo

1. Phạm Thanh Huyền, Nguyễn Hồng Liên. *Công nghệ tổng hợp hữu cơ - hóa dầu*. Nhà xuất bản Khoa học và Kỹ thuật. 2006.
2. Puwanat Wantanachaisaeng, Kevin O'Neil. *Capturing opportunities for para-xylene production*. UOP LLC. 2007.
3. Honeywell/UOP. *Aromatics complex training material*. 2006.
4. Robert A.Meyers. *Handbook of petroleum refining processes (3<sup>rd</sup> edition)*. McGraw-Hill Education. 2004.
5. Honeywell/UOP. *Operator training and simulator*. 2015.
6. Nicholas P.Cheremisinoff. *Handbook of chemical processing equipment*. Butterworth-Heinemann. 2000.
7. Richard Turton, Richard C.Bailie, Wallace B.Whiting, Joseph A.Shaeiwitz, Debangsu Bhattacharyya. *Analysis, synthesis and design of chemical processes (4<sup>th</sup> edition)*. Prentice Hall. 2012.
8. Stanley M.Walas. *Chemical process equipment selection and design*. Butterworth-Heinemann, Reed Publishing (USA) Inc. 1990.
9. Fred A.Meier, Clifford A.Meier. *Instrumentation and control systems documentation*. ISA - The Instrumentation, Systems, and Automation Society. 2004.
10. Gregory K.McMillan, Douglas M.Considine. *Process/Industrial instruments and controls handbook (5<sup>th</sup> edition)*. McGraw-Hill Companies, Inc. 1999.
11. Peter Smith, R.W.Zappe. *Valve selection handbook*. Elsevier, Inc. 2004.

## Simulation and optimisation of operations and troubleshooting for aromatics transalkylation unit (Tatoray)

Nguyen Duy Thuan<sup>1,2</sup>, Tran Quang Hai<sup>1</sup>

Pham Thanh Huyen<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Nghi Son Refinery and Petrochemical LLC

<sup>2</sup>School of Chemical Engineering, Hanoi University of Science and Technology

Email: duythuan@gmail.com

#### Summary

**Oil refineries have been using process simulation softwares for operation optimisation, analysis and troubleshooting, hence contributing to the improvement of production efficiency as well as reliability and stability of plant operation. In this research, the aromatics transalkylation unit (Tatoray) of Licensor UOP was simulated by UOP/Honeywell licensed Unisim Design software. Operation optimisation opportunities for this unit were studied and troubleshooting of common operation issues was also proposed.**

**Key words:** Aromatics transalkylation, Tatoray, Honeywell/UOP, kinetic model, optimisation, troubleshooting.