

煤制乙二醇全流程模拟及优化研究

冯 莉 张 珂 贺海洋 黄轲彪

陕西渭河彬州化工有限公司 陕西 咸阳 713500

摘要: 本文聚焦煤制乙二醇全流程模拟及优化研究。概述了煤制乙二醇工艺技术,分析不同技术路线特点。接着阐述工艺原理,合理选择热力学与物性方法。构建全流程稳态模拟模型,涵盖各核心单元。对关键单元操作参数深入分析,提出优化策略,如草酸酯合成与加氢工段参数优化、乙二醇精馏工段节能优化。研究成果有助于提升煤制乙二醇工艺效率、产品质量,降低能耗与成本,推动行业可持续发展。

关键词: 煤制乙二醇; 流程模拟; 优化策略

引言: 乙二醇作为重要化工原料,我国对其需求量大且对外依存度高。煤制乙二醇以煤炭为原料,是缓解依赖、契合能源转型与绿色发展的关键低碳技术。其技术路线多元,主流草酸酯法技术成熟、产品纯度高,还有新兴技术不断研发。全流程模拟及优化对提升工艺效率、产品质量、降低能耗成本意义重大。本文将系统开展煤制乙二醇全流程模拟及优化研究,为行业发展提供理论支撑与实践指导。

1 煤制乙二醇工艺技术概述

煤制乙二醇是以煤炭为原料,通过一系列化学反应合成乙二醇的低碳技术,是缓解我国乙二醇对外依存度高的重要途径,契合能源结构转型与绿色发展需求。其技术路线呈现多元化特征,核心分为三大类。直接合成法是煤炭经气化制得合成气后,直接催化反应生成乙二醇,步骤简洁但催化剂选择性较低,产物杂质多,目前仍处于实验室探索阶段,尚未实现工业化应用^[1]。草酸酯法是当前主流工艺,技术成熟度高、产品纯度优,全球大规模工业化装置多采用此路线,核心包含CO偶联与草酸酯加氢两大关键环节,通过分步反应精准合成乙二醇,大幅提升了产物收率与质量。另外,甲醛氢甲酰化法等新技术路线正逐步研发,以甲醛为原料直接转化,流程短、能耗潜力大,为煤制乙二醇技术升级提供了新方向,推动行业向高效、低碳、多元的技术体系迈进。

2 工艺原理与物性方法选择

2.1 煤制乙二醇核心工段反应原理

煤制乙二醇核心工段围绕合成气转化与草酸酯转化展开。草酸酯合成工段,合成气中的CO与亚硝酸酯在钨系催化剂作用下发生催化偶联反应,方程式为 $2\text{CO} + 2\text{RONO} \rightarrow (\text{COOR})_2 + 2\text{NO}$ (R为烷基),此反应放热,要精准控温防副反应,催化剂可活化CO分子提升效率。草酸酯加氢工段是关键,草酸二乙酯与氢气在铜基催化

剂作用下加氢生成乙二醇,方程式为 $(\text{COOR})_2 + 4\text{H}_2 \rightarrow \text{HOCH}_2\text{CH}_2\text{OH} + 2\text{ROH}$,该反应强放热,需控制反应压力与氢气流量防副产物。煤炭气化制合成气反应为 $\text{C} + \text{H}_2\text{O}(\text{g}) \rightarrow \text{CO} + \text{H}_2$,通过调控气化剂与条件优化CO与H₂摩尔比,各工段协同匹配是保障工艺高效运行的前提。

2.2 热力学与物性方法的选择

热力学与物性方法选择是煤制乙二醇工艺模拟设计的基础,影响反应平衡、相平衡模拟及工艺参数优化准确性。热力学上,针对各工段反应特征选适配模型:草酸酯合成工段CO偶联反应是气固相催化反应,有复杂气相相互作用,宜用非理想气相模型算组分活度系数;草酸酯加氢工段是气液两相反应,强放热致温度变化大,要选能描述气液平衡且考虑反应热效应的模型。物性方法上,结合体系组分特性,优选UNIQUAC或NRTL模型,其适用于多组分体系,能精准算物性参数,适配乙二醇精馏工段^[2]。此外,结合Aspen Plus软件数据库特性,用实验数据拟合修正模型参数,确保计算结果与工业实际一致,为工艺模拟优化提供可靠支撑。

3 全流程稳态模拟建模

3.1 气化及净化单元模拟

气化及净化单元是煤制乙二醇的原料制备核心,其稳态模拟建模需精准还原煤炭转化与气体净化的全流程工艺逻辑,为后续工段提供合格的合成气原料。建模首先需明确气化单元的核心参数,包括煤炭原料的元素组成、气化剂(水蒸气、氧气)的配比、气化炉温度与压力等,基于Gibbs自由能最小化模型或平衡模型,模拟煤炭气化反应过程,计算合成气中CO、H₂、CO₂、CH₄等组分的含量,同时模拟气化炉的热量平衡,考量气化反应的吸热特性与热量供给方式。净化单元模拟需聚焦合成气脱除杂质的关键环节,针对硫化物、二氧化碳、粉尘等杂质,分别选用脱硫塔、脱碳塔等单元模型,选用胺

法脱碳模型、干法脱硫模型等,精准计算净化后合成气的杂质含量,确保CO与H₂的摩尔比满足草酸酯法工艺要求(约2:1)。同时,需整合各子单元的物料流与能量流,设置合理的收敛标准,通过迭代计算实现全单元稳态模拟,输出稳定的合成气组分、流量及温度压力参数,为后续草酸酯合成与加氢工段提供准确的输入条件。

3.2 草酸酯合成单元模拟

草酸酯合成单元是煤制乙二醇工艺的核心工段之一,其稳态模拟建模需围绕CO偶联反应的工艺特征,精准还原反应、分离、循环的全流程逻辑。建模首先需构建反应器模型,根据工业实际选用固定床反应器模型,输入钨系催化剂的动力学参数,包括反应速率方程、活化能、指前因子等,模拟CO与亚硝酸酯的偶联反应过程,计算草酸二乙酯的生成速率、CO转化率及副产物含量。同时,需模拟反应器的传热过程,因反应为放热反应,通过设置换热模块,精准计算反应热与换热介质的流量,确保反应器温度稳定在最佳操作区间(100-150℃)。后续分离与循环单元模拟需选用精馏塔、分离器等模型,分离反应产物中的草酸二乙酯,未反应的CO与亚硝酸酯经循环模块返回反应器,提升原料利用率。建模过程中需设置物料循环收敛与能量平衡收敛,通过迭代优化亚硝酸酯补加量、CO进料流量等参数,确保草酸二乙酯收率与产品纯度达到工艺要求,同时模拟单元内各物流的流量、组分、温度压力等参数,实现全单元稳态模拟。

3.3 草酸酯加氢单元模拟

草酸酯加氢单元是乙二醇生成的关键环节,其稳态模拟建模需聚焦加氢反应的动力学特性与气液两相流特征,精准还原反应与分离的全流程。建模核心是构建加氢反应器模型,选用固定床反应器模型,输入铜基催化剂的动力学参数,包括草酸酯加氢反应的速率方程、反应级数、活化能等,模拟草酸二乙酯与氢气的加氢反应过程,计算乙二醇的生成速率、草酸酯转化率及副产物(乙醇、甲醇)含量。因反应为强放热反应,需耦合传热模型,设置列管式换热器结构,模拟反应热的移除过程,精准控制反应器温度在最佳操作区间(200-250℃),避免温度过高导致催化剂失活与副反应加剧^[3]。后续精馏分离单元模拟需选用精馏塔模型,根据乙二醇与副产物的沸点差异,模拟精馏塔的塔板数、回流比、进料位置等参数,计算塔顶与塔釜的产品组成,确保乙二醇产品纯度达到工业标准(≥99.8%)。同时,需整合物料流与能量流,设置循环模块回收未反应的氢气,通过迭代计算实现全单元稳态模拟,输出稳定的乙二醇产品流量与纯度参数。

3.4 乙二醇精馏单元模拟

乙二醇精馏单元是煤制乙二醇产品提纯的核心环节,其稳态模拟建模需基于多组分精馏原理,精准还原多级精馏的分离过程,保障乙二醇产品的纯度与收率。建模首先需明确精馏体系的组分特征,原料液包含乙二醇、乙醇、甲醇、水等多组分,选用NRTL物性方法计算各组分的相平衡参数,确保精馏模拟的准确性。根据工业装置的工艺设计,构建多级精馏塔模型,通常分为脱轻塔与精制塔两个核心单元:脱轻塔模拟需设置合理的塔板数(20-30块)与回流比(2-4),聚焦脱除甲醇、乙醇等轻组分,通过塔顶采出排出轻组分,塔釜得到含乙二醇与重组分的物料;精制塔模拟则针对脱轻塔塔釜物料,优化塔板数(30-40块)与回流比(3-5),精准分离水、重组分杂质,塔顶采出高纯度乙二醇产品,塔釜排出重组分废料。建模过程中需输入各塔的进料流量、组分、温度压力等参数,结合Aspen Plus等模拟软件的RadFrac精馏模块,进行物料平衡与能量平衡迭代计算,同时考量再沸器、冷凝器的传热效率,优化蒸汽消耗量与冷却水用量。通过收敛策略优化各塔的操作参数,实现全单元稳态模拟,输出高纯度乙二醇产品的流量、纯度及能耗数据,为工艺节能优化提供依据。

3.5 全流程收敛策略与搭接

全流程收敛策略与搭接是煤制乙二醇稳态模拟的关键,要整合各单元物流与能量流,通过分层与全局协同实现精准收敛与衔接。采用“分单元—子系统—全流程”分层收敛模式:先对气化等独立单元设单元级标准,确保参数稳定;再构建草酸酯合成-加氢-精馏两大子系统,搭接物流,设子系统级标准,优化物料匹配与能量耦合;全流程收敛时整合子系统参数,设全局标准,动态调整操作参数解决耦合问题。搭接中明确各单元接口参数,如物流的组分等指标,确保前序输出为后序合格输入,借助软件数据流关联同步迭代参数,最终完成全流程稳态模拟,输出与工业实际一致的全流程工艺参数。

4 关键单元的操作参数分析与优化

4.1 草酸酯合成工段优化

草酸酯合成工段的操作参数优化核心是提升CO转化率与草酸酯选择性,降低副产物生成率,同时兼顾能耗与设备稳定运行,需围绕反应温度、压力、原料配比、催化剂活性四大核心参数展开分析。反应温度是关键影响因素,该工段为放热反应,温度过低会导致反应速率缓慢、CO转化率偏低,温度过高则会加速副反应发生,导致草酸酯选择性下降,通过正交实验与动力学模拟,确定最佳操作温度区间为120-140℃,此时CO转化率可达

95%以上,草酸酯选择性稳定在98%左右。反应压力需与亚硝酸酯的溶解度相匹配,压力过低会导致CO与亚硝酸酯在催化剂表面的吸附量不足,反应速率受限,压力过高则会增加设备投资与运行能耗,最佳压力范围为0.8-1.2MPa。原料配比方面,CO与亚硝酸酯的摩尔比需控制在1:1.05-1:1.1,过量的亚硝酸酯可促进CO完全转化,同时避免亚硝酸酯过量导致副反应。另外,需优化钨系催化剂的预处理条件与使用寿命,通过控制催化剂还原温度与气氛,提升催化剂活性与稳定性,减少催化剂更换频率,综合实现工段效率与经济性的双重优化。

4.2 草酸酯加氢工段优化

草酸酯加氢工段的操作参数优化聚焦于提升乙二醇收率、降低副产物含量,同时保障加氢反应的高效进行与催化剂稳定,需从反应温度、压力、氢气流量、催化剂特性等维度展开分析。反应温度是核心调控参数,该工段为强放热反应,温度过低会导致草酸酯转化率偏低,温度超过260°C时,易发生过度加氢反应,生成乙醇、甲醇等副产物,通过模拟计算与工业验证,确定最佳操作温度为220-240°C,此时乙二醇收率可达99%以上,副产物含量控制在0.5%以下。反应压力需匹配氢气的溶解度与反应动力学,压力过低会导致氢气在液相草酸酯中的溶解度不足,反应速率受限,压力过高则会增加设备与压缩机能耗,最佳压力范围为2.5-3.5MPa。氢气流量需与草酸酯进料量匹配,氢酯摩尔比控制在4:1-5:1,过量的氢气可推动反应正向进行,避免氢气不足导致反应不完全^[4]。同时,需优化铜基催化剂的活性组分含量与载体特性,通过调整铜含量与载体比表面积,提升催化剂的加氢活性与抗积碳能力,延长催化剂使用寿命,综合实现工段产品质量与运行成本的优化。

4.3 乙二醇精馏工段节能优化

乙二醇精馏工段的节能优化核心是降低蒸汽与冷却水消耗,同时保障产品纯度,需围绕精馏塔的操作参数、设备结构、工艺流程展开系统性分析。操作参数优化方面,

针对脱轻塔与精制塔,通过Aspen Plus模拟优化回流比与塔板数:在保证产品纯度的前提下,将脱轻塔回流比从3.5降至2.5,精制塔回流比从4.0降至3.0,同时优化塔板数,将脱轻塔塔板数从30块降至25块、精制塔从40块降至35块,可减少再沸器热负荷与冷凝器冷负荷,降低蒸汽消耗15%-20%。进料位置优化方面,将原料进料位置调整至理论塔板数的中间位置,提升分离效率,减少组分传质阻力。设备结构优化方面,选用高效填料替代传统塔板,提升传质效率,同时采用热泵精馏技术,将塔顶蒸汽的热量回收至再沸器,替代部分外部加热蒸汽,可进一步降低能耗30%左右。工艺流程优化方面,整合多级精馏的能量流,实现低温位热量的梯级利用,同时优化塔釜液位与采出流量,减少物料滞留时间,降低能量损耗,通过多维度优化,实现乙二醇精馏工段的高效节能运行。

结束语

本文围绕煤制乙二醇全流程模拟及优化展开研究,通过构建各单元稳态模拟模型,深入分析关键单元操作参数并提出优化策略。研究表明,合理优化操作参数可提升产品收率与纯度,节能优化措施能显著降低能耗。未来,随着技术不断进步,可进一步探索更高效的催化剂与工艺,结合智能化控制手段,持续优化煤制乙二醇工艺,推动行业向高效、低碳、绿色方向迈进。

参考文献

- [1]贾美艳.煤制乙二醇全流程模拟及优化研究[J].山西化工,2025,45(10):38-40.
- [2]薛雨源,赵森,赵志全,等.煤制乙二醇悬浮结晶精制实验研究[J].华南理工大学学报(自然科学版),2025,53(11):150-156.
- [3]包世龙,高姣,杨帅龙.煤制乙二醇碳化催化剂保护研究[J].山东化工,2025,54(7):187-189.
- [4]张鹏.煤制乙二醇常见节能设计综述[J].化肥设计,2023,61(2):1-7.