

УДК 66.01:004.422.8

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОМЫШЛЕННЫХ НЕФТЕХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ОБЪЕКТНО-ОРИЕНТИРОВАННОГО ЯЗЫКА DELPHI

И.М. Долганов, Е.В. Францина, Ю.И. Афанасьева, Э.Д. Иванчина, А.В. Кравцов

Томский политехнический университет  
E-mail: evf86@sibmail.com

Разработана и программно реализована в среде Delphi 7.0 компьютерная моделирующая система производства линейных алкилбензолов. Предложен вариант оптимизации действующего производства за счет введения дополнительного рецикла парафинов. Рассчитано оптимальное соотношение рециркуляции непрореагировавшего сырья, равное 0,3. Программный продукт может быть использован для контроля и технического сопровождения работы установки.

### Ключевые слова:

Моделирование приложений, объектно-ориентированное программирование, компьютерная моделирующая система, Delphi, нефтехимический процесс.

### Key words:

Modeling of applications, object-oriented programming, computer modeling system, Delphi, petrochemical process.

В настоящее время для нефтеперерабатывающей промышленности характерно развитие процессов, связанных с дальнейшим углублением переработки углеводородного сырья, увеличением выработки светлых продуктов. К их числу относятся гетерогенно-каталитические процессы: каталитический крекинг, риформинг, гидрокрекинг, алкилирование, изомеризация и др. Отличительной особенностью таких процессов является их нестационарность, вызванная постепенной дезактивацией и старением катализаторов. Основное требование, предъявляемое к эксплуатации катализаторов в промышленных условиях – поддержание максимальной активности, селективности и стабильности, регенерируемости и механической прочности в течение длительного времени. Как правило, подобные требования являются взаимоисключающими и предполагают поиск оптимальных условий эксплуатации катализаторов. Как показывает мировой опыт [1–3], решение этой проблемы связано с использованием компьютерных интеллектуальных систем для хранения, анализа информации, а также прогнозирования технологических показателей промышленно важных процессов.

Компьютерное моделирование химико-технологических систем (ХТС) к настоящему времени полностью доказало свою актуальность и перспективность. С его помощью удастся повысить качество управления ХТС и эффективность их работы, становится возможной и экономическая оптимизация режима эксплуатации установок путем рассмотрения и расчета различных вариантов повышения их производительности [4]. Итак, использование компьютерных моделирующих систем на предприятиях нефтепереработки и нефтехимии позволяет повысить глубину переработки углеводородного сырья, дает возможность проводить анализ и прогнозировать технологические показатели действующего производства, а также рассчитывать и предсказывать материальный баланс процессов

в зависимости от планируемой загрузки установки.

В результате патентного поиска было установлено, что большинство зарегистрированных разработок в области математического моделирования нефтехимических процессов посвящено, в основном, моделированию схем автоматического управления реакторами, и изучению свойств катализаторов и других адсорбционных материалов с помощью математических моделей. Патентообладателями этих разработок являются известные мировые компании, занимающиеся практически исследованиями и проектированием в области химической технологии и катализа, например *Exxon Research Engineering Co* (США), *Sumitomo Chemical Co* (Япония) и др. Заявки на интеллектуальную собственность принадлежат известным транснациональным нефтяным, химическим и нефтехимическим компаниям и исследовательским институтам: *Sud Chemie Inc*, *Abb Lummus Global Inc*, *Saudi Basic Ind Corp*, *Sun Oil Co*, ОАО «Химпром» и др.

Целью данной работы явилось создание математической модели промышленного нефтехимического процесса производства линейных алкилбензолов и его программная реализация с использованием объектно-ориентированного языка Delphi. Необходимо также отметить, что для данного процесса какие-либо зарубежные и российские программные продукты не обнаружены.

Построение интеллектуальной системы представляет собой разработку физико-химической модели и модели для представления знаний.

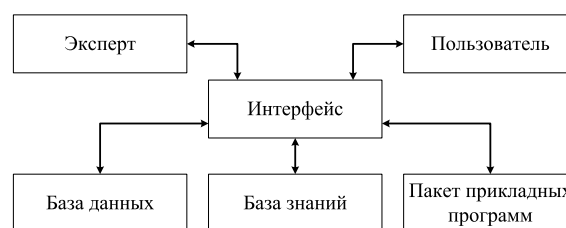


Рис. 1. Основные блоки интеллектуальной системы

Физико-химическая модель позволяет провести расчет кинетики взаимодействия реагентов и сделать количественную оценку скоростей протекания реакций. На основании этих расчетов составляются математические модели каждого из аппаратов и всей ХТС в целом [5].

Модель для представления знаний позволяет использовать информацию в нечисловой форме, составлять диалог пользователя с интеллектуальной системой для расчета и оптимизации ХТС (рис. 1).

Специфика химических многокомпонентных процессов в реакторах затрудняет оптимизацию их систем по сравнению с оптимизацией блоков разделения и теплообмена, а именно:

- динамический нестационарный характер режимов в аппаратах химического превращения;
- многокомпонентность систем уравнений математического описания рассматриваемого класса процессов, обусловленная учетом взаимодействия индивидуальных компонентов смеси;
- многокритериальность и многоэкстремальность целевой функции оптимизации.

Оптимизация вариантов организации реакторного блока с позиции системного анализа предполагает следующие пути:

1. При данной схеме превращения реагентов в реакторах, структуре потоков между аппаратами, значениях конструкционных и технологических параметров определить выходные характеристики процесса на модели и оценить адекватность этих расчетов реальному процессу.
2. При заданном множестве альтернативных вариантов технологической схемы и значений технологических, конструкционных и структурных параметров определить оптимальную топологию системы, технологический режим работы аппаратов и их конструкцию.

Решение этой задачи осуществляется в несколько стадий:

- выявление всех возможных альтернативных вариантов реакторной схемы на основе априорных оценок гипотез;
- создание гипотетически-обобщенной структуры технологической схемы;
- анализ гипотетически-обобщенной структуры технологической схемы при наличии математических моделей всех процессов, протекающих в системе и ее оптимизация путем решения задачи многокритериального анализа

$$\left\{ \begin{aligned} \psi &= \text{optimum} \sum_{n=1}^N \psi_n(\bar{x}, \bar{y}, \bar{u}); \\ y_{ni} &= f_{ni}(x_{n1}, x_{n2}, \dots, x_{ni}, u_n); \\ x_{ni} &= \sum_i^M \sum_j^N \delta_{ni}^{mj} y_{mj}; \\ \sum_i \sum_j \delta_{ni}^{mj} &= 1, \quad 0 \leq \delta_{ni}^{mj} \leq 1; \\ \bar{u} &\leq \bar{u}^*. \end{aligned} \right.$$

где  $x$  – параметры сырья;  $y$  – значения выходных характеристик;  $\psi$  – критерий эффективности;  $u$  – конструкционные и технологические (управляющие) параметры;  $u^*$  – ограничения, накладываемые на управляющие параметры;  $i=1-N$  – число входных технологических потоков;  $j=1-M$  – число выходных технологических потоков;  $\delta_{ni}^{mj}$  – коэффициент структурного разделения, характеризующий структуру рассматриваемой системы.

Комплекс для производства линейных алкилбензолов на основе алкилирования бензола олефинами в присутствии фтористоводородной кислоты включает в себя три технологически связанных реакторных блока: дегидрирования  $n$ -парафинов, гидрирования побочных продуктов процесса дегидрирования и алкилирования.

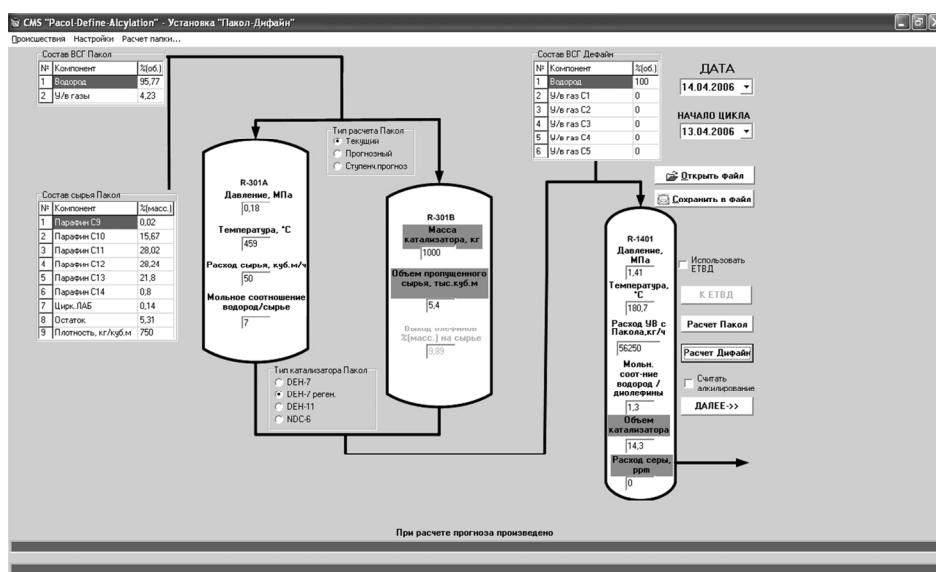
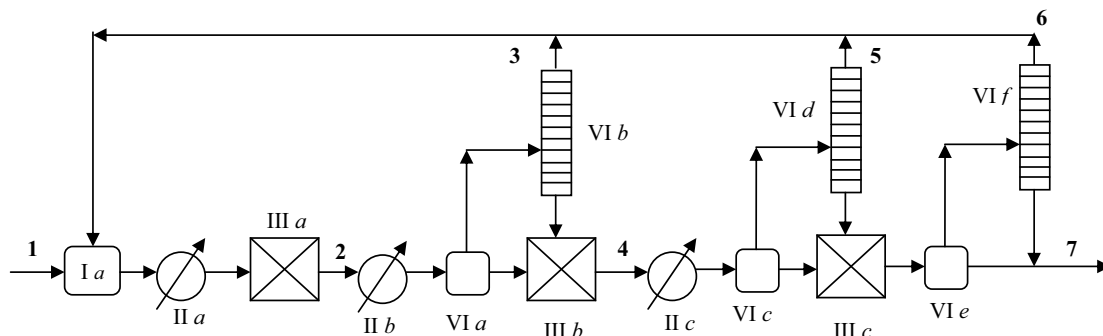
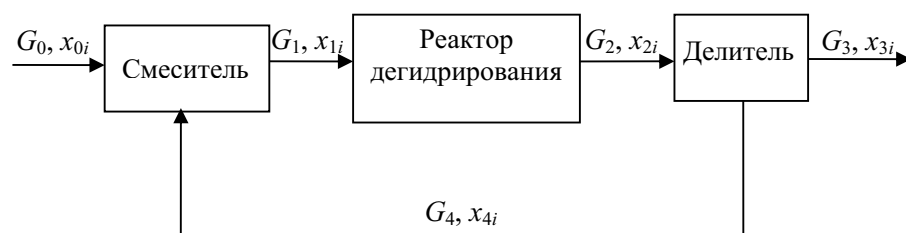


Рис. 2. Диалоговое окно программы по расчету оптимальных кинетических параметров процесса дегидрирования углеводородов  $C_9-C_{14}$



**Рис. 3.** Гипотетическая обобщенная технологическая структура реакторного блока процесса получения линейных алкилбензолов: I) оператор смешения; II) оператор нагрева (охлаждения); III) оператор химического превращения; IV) оператор разделения; 1) исходный поток сырья; 2) продукты процесса дегидрирования; 3, 5; 6) рециркуляционные парафины; 4) продукты процесса гидрирования; 7) продукты процесса алкилирования



**Рис. 4.** Схема процесса дегидрирования с рециклом непрореагировавших парафинов

Для простого доступа к функциям программного продукта необходимо использование интуитивного интерфейса, для этого применяются различные языки программирования, основанные на понятиях классов и объектов. Это отвечает требованиям рынка и совместимо с операционными системами Windows NT/98/2000/XP/Vista.

Программная реализация модели выполнена в интегрированной среде Delphi 7.0. Исходными данными для расчета являются физико-химические свойства углеводородов, покомпонентный состав сырья и состав продуктовой смеси, а также технологические условия проведения процесса. Основное окно программы представлено на рис. 2.

С использованием разработанной математической модели процесса была решена важная технологическая задача – возможность введения рециркуляции части сырьевого потока с целью повышения эффективности процесса (определение соотношения рециркуляции). Данная задача является актуальной, поскольку в процессе дегидрирования проектом принята сравнительно низкая конверсия n-парафинов – 12...13 % (по факту 10 %), поэтому на блок алкилирования поступает значительное количество нормальных парафинов, которые после алкилирования возвращаются в качестве рециркулянта в блок дегидрирования.

Возможны и другие варианты организации рециркуляции непрореагировавших парафинов после реактора для:

- дегидрирования (поток 3 на рис. 3);
- гидрирования (поток 5).

Возможны также некоторые комбинированные способы рециркуляции после реакторов для:

- дегидрирования и алкилирования (потоки 3 и 6);

- гидрирования и алкилирования (потоки 5 и 6). Объединение всех возможных структур дает гипотетически-обобщенную технологическую схему, рис. 3.

Рассмотрим математическую модель процесса рециркуляции парафинов после реактора дегидрирования (рис. 4).

Уравнения материального баланса:

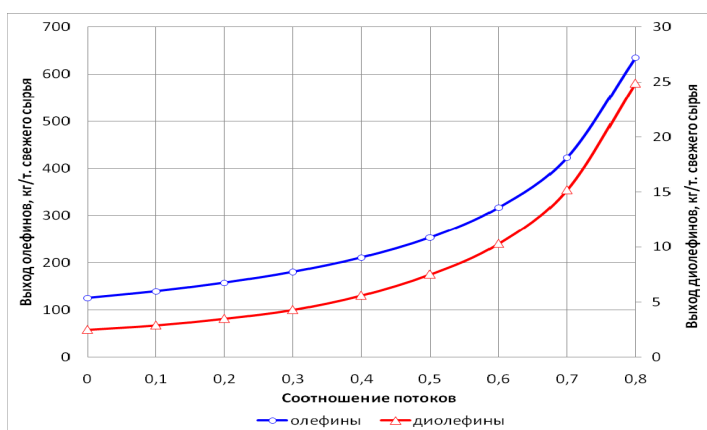
$$\begin{cases} G_1 x_{1i} = G_0 x_{0i} + G_4 x_{4i} \\ G_1 = G_2 \\ G_2 x_{2i} = G_3 x_{3i} + G_4 x_{4i} \\ G_1 = G_0 + G_4 \\ G_2 = G_3 + G_4 \end{cases}$$

Введем величину

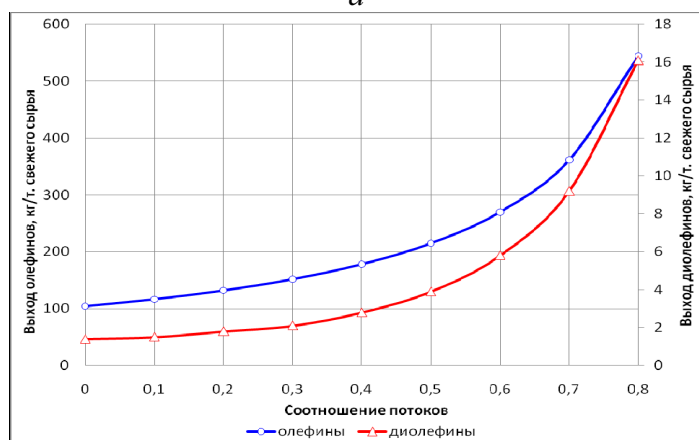
$$\varphi = \frac{G_4}{G_2} = \frac{G_4}{G_1}, \quad \varphi = 0 \dots 1,$$

тогда

$$\begin{cases} x_{1i} = \frac{G_0 x_{0i} + G_4 x_{4i}}{G_1} = \frac{(G_1 - G_4) x_{0i} + G_4 x_{4i}}{G_1} = \\ = (1 - \varphi) x_{0i} + \varphi x_{4i}; \\ x_{3i} = \frac{G_2 x_{2i} - G_4 x_{4i}}{G_3} = \frac{x_{2i} - \frac{G_4}{G_2} x_{4i}}{\frac{G_3}{G_2}} = \\ = \frac{x_{2i} - \frac{G_4}{G_2} x_{4i}}{\frac{G_2 - G_4}{G_2}} = \frac{1}{1 - \varphi} x_{2i} - \frac{\varphi}{1 - \varphi} x_{4i}, \end{cases}$$



а



б

Рис. 5. Зависимость выхода олефинов и диолефинов на тонну свежего сырья от соотношения потоков на катализаторе: а) КД-2 и б) КД-3

где  $G_n$  – общий массовый поток;  $x_{ni}$  – массовая доля, %;  $n$  – номер потока;  $n=0-4$ ;  $i$  – номер компонента;  $i=1-N$ ;  $N$  – число компонентов в потоке.

Таким образом, зная состав исходного потока  $x_{0i}$ , состав отходящего потока  $x_{4i}$  и его массовое соотношение рециркуляции  $\varphi$ , можно рассчитать состав сырья на входе в реакторы дегидрирования  $x_{1i}$  и гидрирования  $x_{3i}$ . Аналогичным образом может быть рассчитаны другие варианты организации рециркуляции непрореагировавших парафинов.

С использованием разработанной программы были проведены расчеты процессов дегидрирования и гидрирования для схемы производства линейных алкилбензолов с рециклом непрореагировавших парафинов после реактора дегидрирования. Наиболее важными показателями качества процессов дегидрирования и гидрирования являются выход целевых продуктов – олефинов и выход побочных – диолефинов на тонну свежего сырья. Расчет процессов дегидрирования и гидрирования проводился на высокоселективных катализаторах дегидрирования КД-2 и КД-3. Результаты расчета приведены на рис. 5.

Из представленных зависимостей видно, что соотношение рециркуляции, равное 0,3, является оптимальным. При этом наблюдается: для катали-

затора КД-2 – увеличение выхода олефинов на 55,2 кг на тонну свежего сырья (приблизительно на 44 %) при увеличении выхода диолефинов на 1,8 кг на тонну свежего сырья (приблизительно на 72 %); для катализатора КД-3 – увеличение выхода олефинов на 47,6 кг на тонну свежего сырья (приблизительно на 46 %) при увеличении выхода диолефинов на 0,7 кг на тонну свежего сырья (приблизительно на 50 %).

### Выводы

Разработана и программно реализована в среде Delphi 7.0 компьютерная моделирующая система производства линейных алкилбензолов. Программный продукт пригоден для контроля и технического сопровождения работы установки и позволяет рассчитывать характеристики текущего процесса, которые не могут быть определены с помощью лабораторных анализов или по текущим показаниям приборов.

Расчеты с использованием созданной компьютерной моделирующей системы позволили сделать вывод, что реконструкция установки и переход на замкнутую химико-технологическую систему путем введения рецикла непрореагировавших парафинов после реактора дегидрирования позволяет

увеличить выход олефинов в среднем на 50 кг на тонну свежего сырья в час. Суммарный доход от внедрения моделирующей программы может составить порядка 225 тыс. р. в сутки.

*Работа выполнена в рамках Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» (ГК № 14.740.11.0548–0720).*

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Lahiri S.K., Khalife N., Lenka C., Al-Balyaa M. Новый подход к мониторингу технологических установок // Нефтегазовые технологии. – 2008. – № 7. – С. 71–77.
2. Куцевич И.В. Система моделирования и оптимизации в нефтехимии // Информационные технологии. – 2003. – № 5. – С. 116–120.
3. Kravtsov A.V., Moskvina V.S., Pleshkova O.E., Usheva N.V. Mathematical model for multi-component petrochemical processes // Reaction kinetics and catalysis letters. – 1986. – V. 30. – № 2. – P. 215–219.
4. Волин Ю.М., Островский Г.М. Три этапа компьютерного моделирования химико-технологических систем // Теоретические основы химической технологии. – 2006. – Т. 40. – № 3. – С. 302–312.
5. Слинко М.Г. История развития математического моделирования каталитических процессов и реакторов // Теоретические основы химической технологии. – 2007. – Т. 41. – № 1. – С. 16–34.

*Поступила 12.04.2010 г.*

УДК 61.01.29

## СОЗДАНИЕ КОМПЬЮТЕРНОЙ МОДЕЛИРУЮЩЕЙ СИСТЕМЫ ПРОЦЕССА АЛКИЛИРОВАНИЯ СО СХемой ПРЕВРАЩЕНИЯ РАЗЛИЧНОГО УРОВНЯ ДЕТАЛИЗАЦИИ

Н.О. Шнидорова, И.О. Долганова, И.М. Долганов, Е.А. Кочегурова

Томский политехнический университет  
E-mail: Nadia\_@sibmail.com

*Разработана и программно реализована на языке объектно-ориентированного программирования C# программа, позволяющая рассчитывать основные показатели процесса алкилирования бензола. Данная модель предполагает возможность математического описания процесса с любым уровнем детализации схемы превращения углеводородов. Предложенный модифицированный метод сканирования применим для определения кинетических параметров в упрощенной математической модели и требует значительно меньшего количества итераций, по сравнению с общеизвестным методом покоординатного поиска. Данная модель является основой создания комплексной программы для расчета технологий процесса твердофазного алкилирования с различным аппаратным оформлением.*

#### Ключевые слова:

*Моделирующая система, схема превращений, алкилирование, обратная кинетическая задача.*

#### Key words:

*Modeling system, reaction network, alkylation, inverse kinetic problem.*

В настоящее время наблюдается повышение спроса на синтетические моющие средства. Линейный алкилбензол (ЛАБ) — один из основных компонентов производства моющих средств, который составляет приблизительно треть часть ингредиентов, которые применяются при производстве моющих средств во всем мире. Столь масштабное использование ЛАБ обусловлено тем, что он абсолютно безопасен для окружающей среды, вследствие чего возникает необходимость повышения производительности промышленных установок по производству ЛАБ. Так как обеспечение оптимального технологического режима для такой системы, как многокомпонентный химический процесс, требует предварительного проведения большого количества натурных экспериментов, материальных и временных затрат, то эксплуатация современных промышленных установок неэффективна без применения моделирующих систем процессов нефтепереработки.

Возможность внедрения компьютерной моделирующей системы на нефтеперерабатывающий завод определяется, в первую очередь, ее адекватностью, то есть сходимостью экспериментальных и расчетных данных. Для достижения требуемой погрешности (погрешность хроматографического анализа составляет около 5 %), необходимо решение обратной кинетической задачи, т. е. нахождение кинетических параметров по известным экспериментальным данным. Кинетические параметры — важнейшие показатели скорости протекания химической реакции, которые зависят от концентрации реагентов, энергетического и структурного реакционного барьера [1]. В основу предлагаемой программы, как и в большинство современных проектов, положена идея объектно-ориентированного программирования [2, 3].

Программное обеспечение, разработанное с использованием языка C#, может применяться