

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. Слинько 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 третью 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

не только для разработки автономного программного обеспечения, но и для управления и мониторинга промышленных установок на предприятиях любого профиля.

Химическая промышленность не является исключением. В этой связи на кафедре химической технологии топлива и химической кибернетики Института природных ресурсов при сотрудничестве с Институтом кибернетики Томского политехнического университета впервые ведутся разработки программного комплекса для моделирования процесса алкилирования бензола высшими олефинами с использованием языка программирования C# в среде Visual Studio 2008. Данная программа позволяет динамически создавать математическую модель процесса алкилирования на основе схемы превращения любого уровня детализации, а также рассчитывать основные показатели моделируемого процесса.

Разработка описываемой компьютерной программы включает следующие этапы:

- 1) построение схемы превращения углеводородов;
- 2) термодинамический анализ возможности протекания реакций в построенной схеме превращения;
- 3) определение гидродинамического и теплового режимов работы реактора;
- 4) создание математической модели процесса и ее компьютерная реализация.

Согласно термодинамическим расчетам и имеющимся экспериментальным данным по составу сырья и продуктов процесса алкилирования бензола олефинами, в ходе процесса протекают следующие реакции (таблица).

Таблица. Реакции, протекающие в процессе алкилирования

№ п.п.	Реакция
1	Олефин-1 ₍₁₀₋₁₄₎ =Олефин-2 ₍₁₀₋₁₄₎
2	Олефин-2 ₍₁₀₋₁₄₎ =Олефин _{инт(10-14)}
3	Олефин-1 ₍₁₀₋₁₄₎ =Изоолефин ₍₁₀₋₁₄₎
4	Бензол+Олефин-1 ₍₁₀₋₁₄₎ =ЛАБ-2 ₍₁₀₋₁₄₎
5	Бензол+Изоолефин ₍₁₀₋₁₄₎ =НАБ ₍₁₀₋₁₄₎
6	Бензол+Олефин-2 ₍₁₀₋₁₄₎ =ЛАБ-2 ₍₁₀₋₁₄₎
7	Бензол+Олефин _{инт(10-14)} =ЛАБ _{инт(10-14)}
8	ПсевдоЛАБ+ПсевдоОлефин=ДАБ
9	ЛАБ _{непр} +ПсевдоОлефин=ДАБ _{непр}
10	ПсевдоЛАБ+Диолефин=ДАБ _{непр}
11	Бензол+Диолефин ₍₁₀₋₁₄₎ =ЛАБ _{непр}
12	Бензол+ЛАБ _{непр} =ДФА

Обозначения в таблице: Олефин-1 – олефины C₁₀–C₁₄ нормального строения с двойной связью после первого атома углерода; Олефин-2 – олефины C₁₀–C₁₄ нормального строения с двойной связью после второго атома углерода; Изоолефин – олефины C₁₀–C₁₄ разветвленного строения (вне зависимости от положения двойной связи); Диоле-

фин – сумма сопряженных олефинов C₁₀–C₁₄; НАБ (нелинейный алкилбензол) – ЛАБ с боковой цепью разветвленного строения вне зависимости от места присоединения бензольного кольца; ЛАБ_{непр} – ЛАБ (линейный алкилбензол) с непредельной боковой цепью вне зависимости от ее разветвленности и положения бензольного кольца; ЛАБ-2 – ЛАБ с углеродной цепью, присоединенной к бензолу вторым атомом углерода; ДАБ – диалкилбензолы с насыщенными связями вне зависимости от строения боковых цепей и положения бензольного кольца; ДАБ_{непр} – диалкилбензолы с непредельной боковой цепью; Диолефины – сумма диолефинов нормального и изостроения; ДФА – дифенилалканы; ПсевдоЛАБ – ЛАБ с предельной боковой цепью вне зависимости от ее разветвленности и положения бензольного кольца; ПсевдоОлефины – олефины вне зависимости от разветвленности углеродного скелета и положения двойной связи; Олефин_{инт} – интернальная подгруппа олефинов, включающая все линейные изомеры по двойной связи, кроме Олефина-1 и олефина-2; ЛАБ_{инт} – интернальная подгруппа ЛАБ, в которой боковой цепью являются Олефины_{инт}. Возможность протекания данных реакций подтверждается расчетными значениями изменения энергии Гиббса ($\Delta G < 0$) [4, 5].

Приняв во внимание допущение о неизменности активности катализатора во времени, запишем его окончательное математическое описание в виде системы дифференциальных уравнений материального и теплового балансов

$$\frac{dC_i}{d\tau} = W_j,$$

$$\rho^{CM} C_p^{CM} \frac{\partial T}{\partial \tau} = \pm \sum_{j=1}^N Q_{x.p.j} W_j.$$

Начальные условия: $t=0$, $C_i=C_{0i}$, $T=T_{вх}$, где i – соответствующий углеводород; C_i – концентрация i -го реагента, моль/л; τ – время контакта, с; $Q_{x.p.j}$ и W_j – теплота и скорость химической реакции, C_p^{CM} – молярная теплоемкость реакционной смеси, ρ^{CM} – плотность реакционной смеси, T – температура, К.

Приведенная система уравнений решена методом Рунге–Кутты 1-го порядка.

На рис. 1 представлено главное диалоговое окно разработанного программного продукта.

В первую очередь пользователь вводит информацию о веществах, участвующих в реакциях, а также значения необходимых параметров. Состав вещества можно задать в свойстве «Состав» напротив его имени, после чего появится окно, изображенное на рис. 2.

Здесь необходимо выбрать компоненты, входящие в состав вещества. Например, расход компонента «Олефина» может включать в себя расходы компонентов «Олефин-1», «Олефин-инт», «Олефин-2», «И-олефин».

После этого пользователь переходит на вкладку «Схема превращений» (рис. 3), где добавляет нуж-

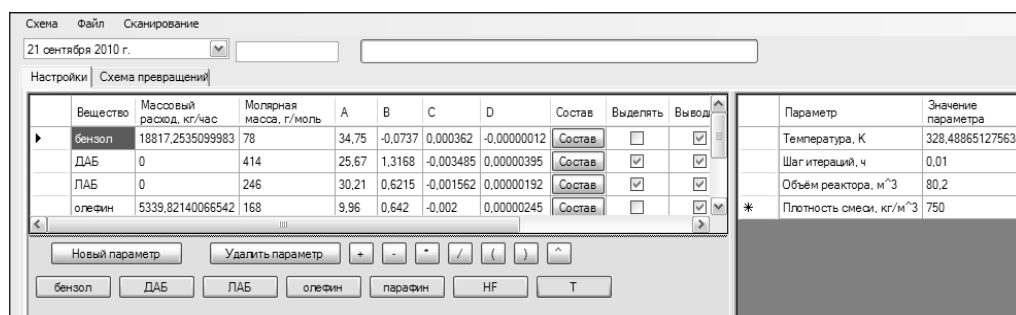


Рис. 1. Интерфейс программы расчета показателей процесса

ное количество реакций и выбирает реагирующие вещества и продукты реакций.

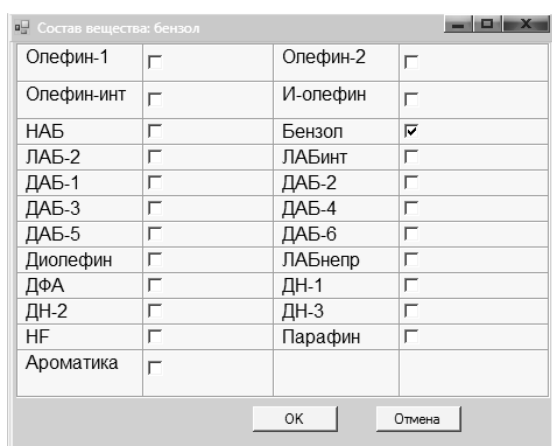


Рис. 2. Скриншот окна «Состав вещества»

Реакция добавляется при нажатии на кнопку «Добавить реакцию». Реакции можно удалить, отметив их и нажав на кнопку «Удалить реакции». Кроме того, предусмотрено сохранение составленных схем превращений и загрузка сохранённых ранее схем для удобства пользователя.

После нажатия на кнопку «Расчёт» осуществляется расчёт массовых расходов и температуры на выходе из реактора и вывод полученной информации в удобном для пользователя виде. Полученные результаты доступны для экспортирования в MS Excel.

Для облегчения работы пользователя существует возможность сохранения составленных схем превращения. Сохранение и загрузка производится путём вызова соответствующих пунктов меню.

Для сохранения реакций используется формат *.xml. Ниже приводится фрагмент файла *.xml с информацией о реакциях одной из сохранённых схем превращений (рис. 4).

В данном фрагменте представлены характеристики всех участвующих в схеме превращений веществ (бензол, ЛАБ, ДАБ, олефин): массовый расход, молярная масса, коэффициенты для расчета теплоемкости, рис. 1.

Предложенный алгоритм решения обратной кинетической задачи реализован следующим образом.

За основу взят метод сканирования, представляющий перебор всех возможных значений в заданном интервале при фиксированном шаге. В нашем случае кинетические параметры определяются

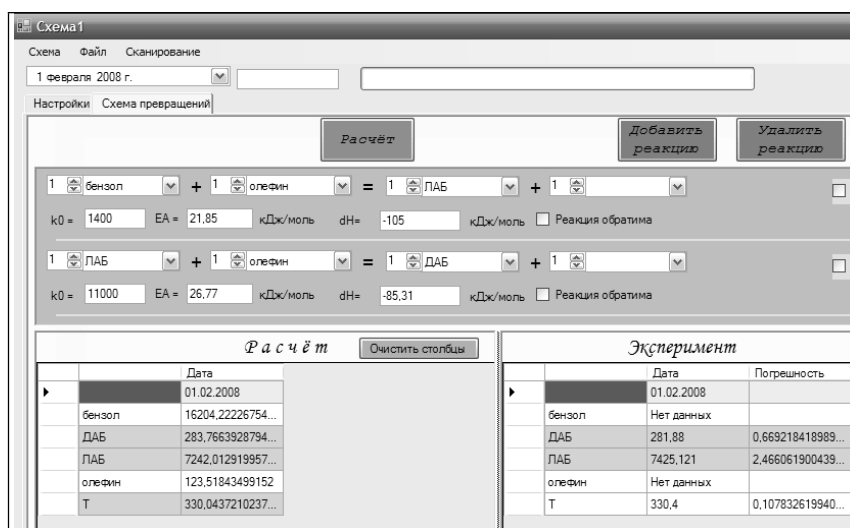


Рис. 3. Окно редактора схемы превращений

```
<Substances>
<Substance Вещество="бензол" Массовый="18817,2535099983" Молярная="78" A="34,75" B="-0,0737"
C="0,000362" D="-0,00000012" Состав="Состав" Выделять="0" Выводить="1" Адрес="" Расчитать="" />
<Substance Вещество="ДАБ" Массовый="0" Молярная="414" A="25,67" B="1,3168" C="-0,003485"
D="0,00000395" Состав="Состав" Выделять="1" Выводить="1" Адрес="B3" Расчитать="" />
<Substance Вещество="ЛАБ" Массовый="0" Молярная="246" A="30,21" B="0,6215" C="-0,001562"
D="0,00000192" Состав="Состав" Выделять="1" Выводить="1" Адрес="B2" Расчитать="" />
<Substance Вещество="олефин" Массовый="5339,82140066542" Молярная="168" A="9,96" B="0,642"
C="-0,002" D="0,00000245" Состав="Состав" Выделять="0" Выводить="1" Адрес="" Расчитать="" />
<Substance Вещество="парафин" Массовый="0" Молярная="170" A="9,96" B="0,642" C="-0,002"
D="0,00000245" Состав="Состав" Выделять="0" Выводить="0" Адрес="0" Расчитать="0" />
<Substance Вещество="HF" Массовый="0" Молярная="20" A="15,093" B="0,0326" C="0,0002"
D="0,000002" Состав="Состав" Выделять="0" Выводить="0" Адрес="0" Расчитать="0" />
</Substances>
```

Рис. 4. Фрагмент файла с исходными данными

с точностью до трёх знаков после запятой. Алгоритм обычного метода сканирования был модифицирован следующим образом.

- 1) Выбираются области значений констант K_1 и K_2 на основе литературных данных о кинетике процесса [4].
- 2) Движение внутри каждой области выполняется с достаточно большими шагами h_1 и h_2 , соответственно.
- 3) Определяются константы k'_1 и k'_2 , при которых достигается наилучшее совпадение экспериментальных и расчетных данных.
- 4) Предыдущая область значений заменяется на $K'_1=[k'_1-h_1, k'_1+h_1]$ и $K'_2=[k'_2-h_1, k'_2+h_2]$.
- 5) Размер шагов h_1 и h_2 понижается до существенно меньших значений h'_1 и h'_2 (в данном случае использовалось десятикратное уменьшение шага).
- 6) Пункты 2–5 повторяются до достижения требуемой точности.

Предложенная методика решения обратной кинетической задачи была отработана на простейшей схеме превращений, учитывающей протекание только двух реакции, в результате которых образуются товарные продукты процесса алкилирования – ЛАБ и тяжелый алкилат. В результате реализации описанной методики были получены кинетические параметры, обеспечивающие совпадение расчетных и экспериментальных данных (выход ЛАБ и тяжелого алкилата, температура процесса T) с требуемой точностью (рис. 5–7).

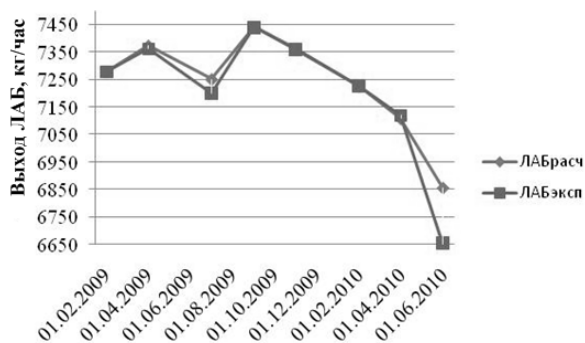


Рис. 5. Сравнение расчетного и экспериментального выхода ЛАБ

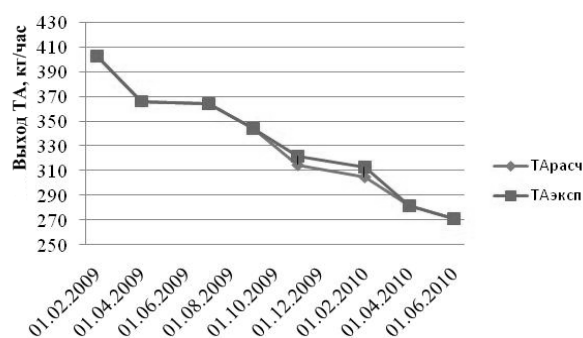


Рис. 6. Сравнение расчетного и экспериментального выхода тяжелого алкилата

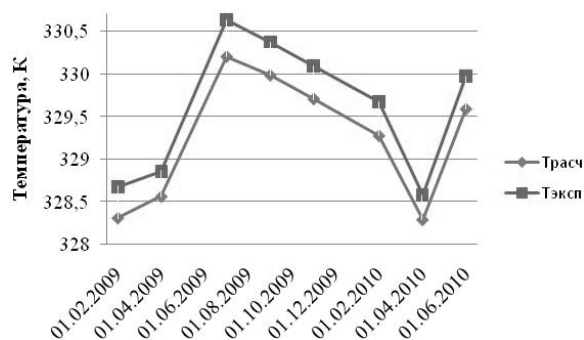


Рис. 7. Сравнение расчетной и экспериментальной температуры

Погрешность расчета на модели рассчитывалась по формуле

$$\Delta = \frac{C_{\text{exp}} - C_{\text{count}}}{C_{\text{exp}}} \cdot 100 \%,$$

где C_{exp} и C_{count} – экспериментальные и расчетные значения выхода ЛАБ, ДАБ и температуры. При найденных значениях кинетических параметров для всех показателей процесса погрешность не превышает 1 %.

Проведенная работа по разработке математической модели процесса алкилирования бензола олефинами являлась важнейшим шагом в решении задач оптимизации процесса производства СМС.

Результаты расчётов для исходной схемы превращений позволяют говорить об адекватности модели и правильности реализации программы.

Дальнейшее развитие работ предполагает расширение схемы превращений для обеспечения возможности расчета не только количественных (выход ЛАБ и тяжёлого алкилата), но и качественных (бромный индекс ЛАБ, бромное число тяжёлого алкилата) показателей процесса; учета влияния состава сырья на выход продуктов; проведения мониторинговых работ и прогнозных расчетов. Данная модель будет являться основой создания комплексной программы для расчета технологий процесса твердофазного алкилирования с различным аппаратным оформлением.

Выводы

1. Разработана и реализована на языке С# программа расчета основных показателей процесса

алкилирования бензола олефинами.

2. Предложена модель, позволяющая математически описать процесс с любым заданным уровнем детализации схемы превращения углеводородов.
3. Предложен алгоритм поиска кинетических параметров в упрощенной математической модели, требующий значительно меньшего количества итераций, по сравнению с традиционным методом покоординатного поиска.
4. Решена обратная кинетическая задача упрощенной схемы превращений углеводородов в процессе алкилирования.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Баннов П.Г. Процессы переработки нефти. — М.: ЦНИИТЭ нефтехим, 2001. — 625 с.
2. Бадд Т. Объектно-ориентированное программирование в действии: пер. с англ. — СПб.: Питер, 1997. — 464 с.
3. Павловская Т.А. С/С++: программирование на языке высокого уровня. — СПб.: Питер, 2002. — 464 с.
4. Шнидорова И.О., Фетисова В.А., Ивашкина Е.Н., Иванчина Э.Д., Кравцов А.В. Разработка кинетической модели процесса алкилирования бензола олефинами // Известия Томского

политехнического университета. — 2009. — Т. 314. — № 3. — С. 89–93.

5. Фетисова В.А., Ивашкина Е.Н., Иванчина Э.Д., Кравцов А.В. Построение математической модели процесса алкилирования бензола высшими олефинами // Катализ в промышленности. — 2009. — № 6. — С. 27–33.

Поступила 08.10.2010 г.

УДК 669.162.28

ПРИМЕНЕНИЕ СЕРВИС-ОРИЕНТИРОВАННОЙ АРХИТЕКТУРЫ ПРИ ИНТЕГРАЦИИ СИСТЕМ УПРАВЛЕНИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИМИ ПРОЦЕССАМИ

Н.И. Ткаченко, Н.А. Спирин*

ОАО «НПК «Уралвагонзавод», г. Нижний Тагил

*ГОУ ВПО «Уральский государственный технический университет – УПИ им. первого Президента России Б.Н. Ельцина», г. Екатеринбург
E-mail: tkachenni@mail.ru

Отражен опыт применения сервис-ориентированной архитектуры при создании автоматизированных систем управления технологическими процессами и их интеграции на ОАО «НПК «Уралвагонзавод».

Ключевые слова:

Технология разработки программного обеспечения, автоматизированные системы управления, сервис-ориентированная архитектура, интеграция автоматизированных систем.

Key words:

Software engineering, automated control systems, service oriented architecture, integration of automated systems.

Сервис-ориентированная архитектура (COA) является новым направлением в построении корпоративных автоматизированных и информационных систем и специально предназначена для интеграции разно-платформенных приложений, обеспечивающих бизнес-процессы на производстве [1, 2]. Бизнес-процесс «Управление производственными процессами» имеет свою программно-аппаратную архитектуру на уровнях Input/Output, Control с интерфейсом для интеграции в АСУ уровня цеха. Именно этот интерфейс и использу-

ются для построения COA АСУ цеха. Все основные бизнес-процессы цеха, как правило, реализованы программным обеспечением разных разработчиков. Таким образом, в цехе может существовать несколько независимых автоматизированных систем со своими базами данных и даже с дублированием данных (НСИ — нормативно-справочная информация, производственные показатели и т. д.). Практически всегда такое программное обеспечение создается под конкретный бизнес-процесс без возможности изменения бизнес-логики програм-