

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ АЛКИЛИРОВАНИЯ И СУЛЬФИРОВАНИЯ ПРИ ПРОИЗВОДСТВЕ АБСК

А.А. Бунаев, И.О. Долганова

Научный руководитель доцент И.М. Долганов

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск, Россия

В наши дни происходит постепенное увеличение спроса на моющие средства синтетического происхождения. Одними из основных компонентов, применяющихся в производстве подобных средств, являются линейные алкилбензолы – это примерно треть ингредиентов, использующихся при изготовлении моющих средств во всем мире. Столь широкое применение линейных алкилбензолов объясняется тем, что они совершенно безопасны по отношению к окружающей среде. Это, в свою очередь, вызывает необходимость в увеличении производительности установок производства линейных алкилбензолов. Для такой сложной системы, как многокомпонентный химический процесс, обеспечение и поддержание оптимального технологического режима вызывает необходимость в проведении достаточно большого количества экспериментов различной сложности, что влечет за собой привлечение, соответственно, большого количества различных ресурсов и временных затрат. Таким образом, использование современных установок на производстве неэффективно без привлечения к этому различных моделирующих систем, в данном случае, процессов нефтепереработки. [5]

Программные комплексы, созданные с помощью принципов объектно-ориентированного программирования, имеют применение не только в области разработки программного обеспечения специфического или узконаправленного прикладного значения, но также для целей прогнозирования и мониторинга режимов работы установок на предприятиях. [1] При этом, несмотря на положительные тенденции в сфере компьютерного моделирования, отдельные вопросы, касающиеся, в первую очередь, оптимизации производства на взаимосвязанных объектах, остаются до сих пор нерешенными. [2] Так, например, при внесении изменения в режим работы одного реактора может увеличиться его эффективность, но при этом пострадает качество промежуточных и конечных продуктов следующих стадий, а, возможно, даже это может привести к остановке работы всей производственной цепи.

Возможность к внедрению математической модели в реальное производство на нефтеперерабатывающем заводе определяется, главным образом, ее адекватностью – сходимостью результатов расчетов, полученных с помощью данной моделирующей системы, и экспериментальных данных. Таким образом, для достижения требуемой точности, необходимо решить обратную кинетическую задачу: найти неизвестные кинетические параметры с помощью известных экспериментальных данных.

Таким образом, разработка компьютерной программы моделирования процесса производства АБСК включает в себя такие этапы как: во-первых, создание схемы реакций, имеющих место быть в процессе, протекающих с участием рассматриваемых углеводородов. Во-вторых, необходимо проведение анализа термодинамических условий процесса – исследование, собственно, теоретической возможности протекания реакций указанных в полученной ранее схеме. В-третьих, необходимо определить режимы, в которых происходит работа реакторов: как гидродинамического, так и теплового. Наконец, финальным этапом является создание, собственно, самой математической модели, а также ее воплощение в виде законченного программного обеспечения. [3]

На рисунке 1 представлено основное диалоговое окно программы, разработанной на языке Delphi 7.

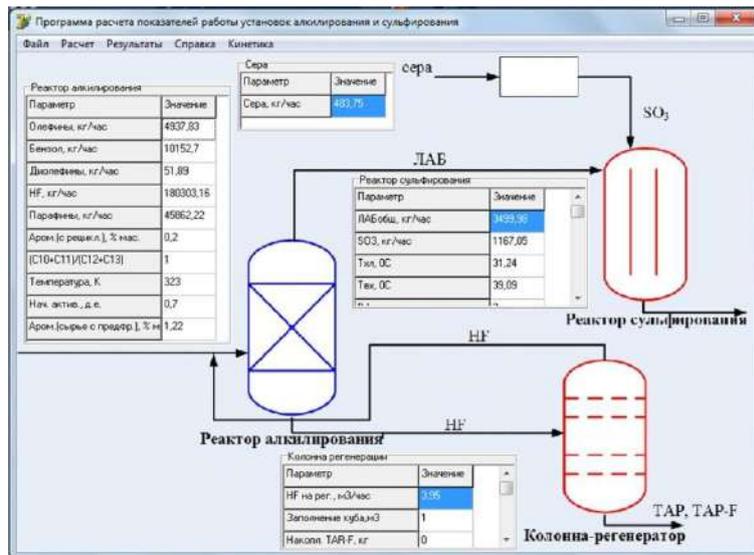


Рис. 1 Графический интерфейс программы

Созданная моделирующая система процессов алкилирования и сульфирования, таким образом, имеет в себе возможность выполнения таких функций, как: проведение типовых расчетов состава продуктовых потоков, длин межпромывочных циклов реактора сульфирования и иных выходных параметров при заданных составах сырья и

**СЕКЦИЯ 13. СОВРЕМЕННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ПОДГОТОВКИ И ПЕРЕРАБОТКИ
ПРИРОДНЫХ РЕСУРСОВ. ПОДСЕКЦИЯ 2. ХИМИЧЕСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ
ПОДГОТОВКИ И ПЕРЕРАБОТКИ ГОРЮЧИХ ИСКОПАЕМЫХ**

технологических параметрах, расчеты нескольких наборов исходных данных считанных из файла. Также реализована функция оптимизации работы установки алкилирования углеводородов и колонны регенерации фтороводородного катализатора, использующегося в данном процессе. Кроме того, возможна корректировка кинетических параметров всего процесса в целом, для каждой установки. [4]

В основе работы данного моделирующего комплекса заложен следующий алгоритм:

На первом этапе производится поиск околооптимальных областей расположения значений необходимых кинетических параметров с помощью метода сканирования. В качестве компьютерной реализации этого шага алгоритма поиска кинетических параметров выступает найденное множество локальных минимумов целевой функции, а также погрешности при найденных кортежах значений кинетических параметров.

Полученные на предыдущем шаге околооптимальные области значений исследуются с помощью симплексного метода оптимизации – методом Нелдера-Мида, в данном случае. Данная оптимизация выполняется для всех имеющихся наборов данных, имеющих свои определенные составы сырья и продуктов. Расчет величины погрешности для данного конкретного набора параметров проводится для всех точек, а в качестве итоговой выбирается погрешность, имеющая максимальное значение.

В случае если не удастся произвести расчет набора параметров, позволяющих дать описание рассматриваемого процесса с какой-то заданной требуемой точностью, то необходимо переопределение интервалов поиска, чтобы заново начать исполнение данного алгоритма.

Для отображения результатов разработки моделирующей системы данная методика решения была отработана на получении зависимости выхода алкилбензолсульфофосфорной кислоты из реактора сульфирования от количества ароматических соединений в сырье для процесса алкилирования. Результаты представлены на рисунке 2.

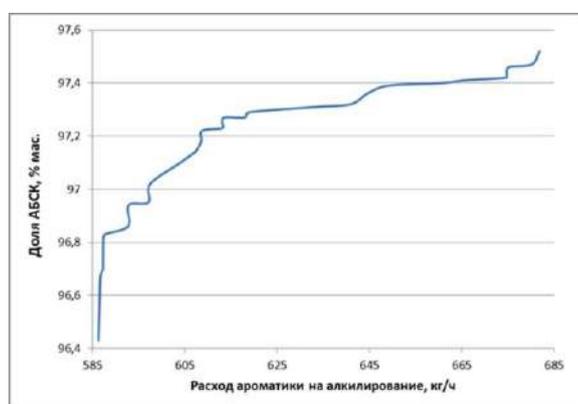


Рис. 2 Зависимость выхода алкилбензолсульфофосфорной кислоты от расхода ароматических углеводородов на алкилирование

Полученный график демонстрирует, что с увеличением расхода ароматических углеводородов, поступающих в реактор алкилирования, доля алкилбензолсульфофосфорной кислоты в потоке продуктов на выходе из реактора сульфирования, соответственно образом, возрастает.

Таким образом, был разработан алгоритм поиска кинетических параметров реакций для процессов сульфирования и алкилирования, что, по сути, определяет все остальные их параметры. Также модель была реализована с помощью языка Delphi 7 и протестирована.

Литература

1. Долганов И. М., Киргина М. В., Ивашкина Е. Н., Иванчина Э. Д., Долганова И. О. Оптимизация аппаратного оформления процесса дегидрирования высших алканов с использованием метода математического моделирования // Известия ТПУ. – 2012, №3. – 84-88 с.
2. Долганов И. М., Францина Е. В., Афанасьева Ю. И., Иванчина Э. Д., Кравцов А. В. Моделирование промышленных нефтехимических процессов с использованием объектно-ориентированного языка Delphi // Известия ТПУ. – 2010, №5. – 53-57 с.
3. Долганова И. О., Ивашкина Е. Н., Иванчина Э. Д. Математическое моделирование в задачах повышения эффективности работы установки производства линейных алкилбензолов // Известия ТПУ. – 2011, №3. – 109-112 с.
4. Долганова И. О., Фетисова В. А., Шнидорова Н. О., Иванчина Э. Д. Разработка и программная реализация алгоритма решения обратной кинетической задачи для процесса алкилирования бензола олефинами C10-C14 // Известия ТПУ. – 2010, №3. – 117-121 с.
5. Шнидорова Н. О., Долганова И. О., Долганов И. М., Кочегурова Е. А. Создание компьютерной моделирующей системы процесса алкилирования со схемой превращения различного уровня детализации // Известия ТПУ. – 2010, №5. – 57-61 с.