

Список литературы

1. Бабкин К.Д., Макаров А.Д. Применение кислородсодержащих октаноповышающих добавок при производстве бензинов с улучшенными экологическими свойствами // *Защита окружающей среды в нефтегазовом комплексе*, 2019.– №4.– С.25–33. DOI: 10.33285/2411-7013-2019-4(289)-25-33.
2. Ершов М.А., Емельянов Е.В., Григорьева Е.В., Хабибуллин Некоторые пути улучшения экологических характеристик автомобильного бензина в России // *Экологический вестник России*, 2016.– №1.– С.18–20.
3. Ганина А.А., Кузорова И.Е., Дьячкова С.Г., Дубровский Д.А., Седлов Д.Н. Использование побочных потоков товарного производства нефтепродуктов // *Известия вузов. Прикладная химия и биотехнология*, 2019.– Т.9.– №3.– С.536–546. DOI: 10.21285/2227-2925-2019-9-3-536-546.

ОБОБЩЕННОЕ ДЕТЕРМИНИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЛЯ ОПТИМИЗАЦИИ РЕАКЦИОННО-РЕКТИФИКАЦИОННЫХ КОЛОНН

К.Э. Гарсия Серпас

Научный руководитель – к.т.н., доцент М.А. Самборская

Национальный исследовательский Томский политехнический университет
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, karlosenrike1@tpu.ru

1. Описание модели

Представленный способ математического моделирования реакционно-ректификационной колонны является расширением метода одновременной коррекции SC (simultaneous correction), предложенного Нафтали и Сандхолмом [1], и подходит для детерминистической оптимизации технологических систем.

Уравнения материального и теплового баланса, и парожидкостного равновесия выражаются в индивидуальных компонентных расходах и суммарных фазовых энтальпиях.

$$H_j = (1 + U_j/L_j)H_{Lj} + (1 + W_j/U_j)H_{Vj} - H_{Lj-1} - H_{Vj+1} - H_{Fj} - Q_j + H_{ij} = 0 \quad (1)$$

$$M_{ij} = (1 + U_j/L_j)l_{ij} + (1 + W_j/U_j)v_{ij} - l_{ij-1} - v_{ij+1} - f_{ij} - r_{ij} = 0 \quad (2)$$

$$E_{ij} = \frac{\eta K_{ij} l_{ij} V_j}{L_j} - v_{ij} + \frac{(1-\eta)v_{ij+1} V_j}{V_{j+1}} = 0 \quad (3)$$

где $i=1, 2, \dots, C$ компонентов, $j=1, 2, \dots, N$ тарелок, r_{ij} – суммарная скорость образования/израсходования компонента i из-за всех реакций; H_{ij} – суммарный тепловой эффект реакций.

Степени свободы составляют: число тарелок N , условия питания, боковые материальные и тепловые отборы. Для всех тарелок уравнения (1), (2) и (3) дают систему из $N(2C+1)$ уравне-

ний в $N(2C+1)$ независимых переменных v_{ij} , T_j и l_{ij} .

2. Решение

Выражая модель колонны в виде матричного уравнения, получают:

$$F(X) = 0$$

$$F(X) = [F_1, F_2, F_3, \dots, F_N]^T$$

$$F_j = [H_j, M_{1j}, M_{2j}, M_{3j}, \dots, M_{Cj}, E_{1j}, E_{2j}, E_{3j}, \dots, E_{Cj}]^T \quad (4)$$

$$X = [X_1, X_2, X_3, \dots, X_N]^T$$

$$X_j = [v_{1j}, v_{2j}, v_{3j}, \dots, v_{Cj}, T_j, l_{1j}, l_{2j}, l_{3j}, \dots, l_{Cj}]^T$$

Систему (4) решают итеративно методом Ньютона-Рафсона. Для каждой векториальной функции F_j выполняется разложение Тейлора.

$$\sum_{n=1}^N \left[\left(\frac{\partial F_j}{\partial X_n} \right)^{(k)} \Delta X_n^{(k)} \right] = -F_j^{(k)} \quad (5)$$

Применяя (5) для всех функций F_j , система (4) принимает вид системы $N \times N$ линейных уравнений по поправкам ΔX_n .

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial X_1} & \frac{\partial F_1}{\partial X_2} & \frac{\partial F_1}{\partial X_3} & \dots & \frac{\partial F_1}{\partial X_N} \\ \frac{\partial F_2}{\partial X_1} & \frac{\partial F_2}{\partial X_2} & \frac{\partial F_2}{\partial X_3} & \dots & \frac{\partial F_2}{\partial X_N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial F_N}{\partial X_1} & \frac{\partial F_N}{\partial X_2} & \frac{\partial F_N}{\partial X_3} & \dots & \frac{\partial F_N}{\partial X_N} \end{bmatrix}^{(k)} \cdot \begin{bmatrix} \Delta X_1 \\ \Delta X_2 \\ \Delta X_3 \\ \vdots \\ \Delta X_N \end{bmatrix}^{(k)} = - \begin{bmatrix} F_1 \\ F_2 \\ F_3 \\ \vdots \\ F_N \end{bmatrix}^{(k)} \quad (6)$$

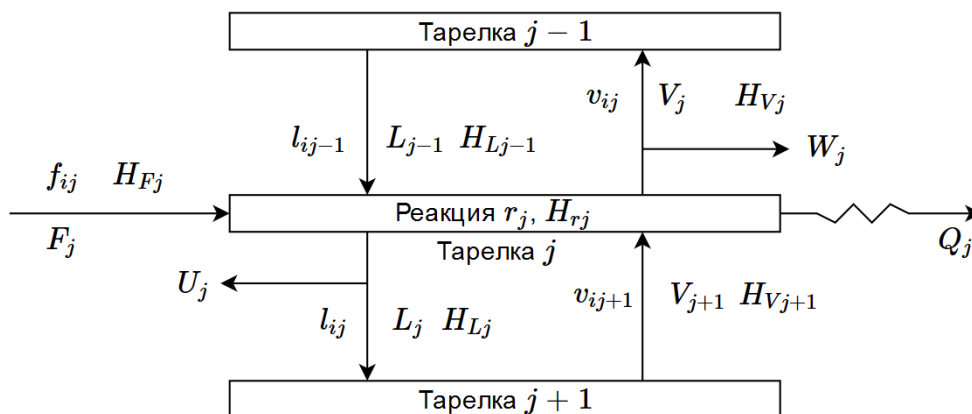


Рис. 1. Схема организации потоков

Функции F_j зависят только от переменных X_n из тарелок $j-1, j$ и $j+1$. Тогда $\partial F_j / \partial X_n = 0$ если: $n < j-1$ или $n > j+1$. Якобиан в системе (6) принимает структуру три-диагональной матрицы.

$$\begin{bmatrix} B_1 & C_1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ A_2 & B_2 & C_2 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & A_3 & B_3 & C_3 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & A_N & B_N \end{bmatrix}^{(k)} \cdot \begin{bmatrix} \Delta X_1 \\ \Delta X_2 \\ \Delta X_3 \\ \vdots \\ \Delta X_N \end{bmatrix}^{(k)} = - \begin{bmatrix} F_1 \\ F_2 \\ F_3 \\ \vdots \\ F_N \end{bmatrix}^{(k)} \quad (7)$$

Элементы A_j, B_j и C_j являются подматрицами из производных функций F_j по переменным $X_{i,j-1}, X_{i,j}$ и $X_{i,j+1}$ соответственно.

Уравнение (7) решают для поправок $\Delta X_n^{(k)}$ методом Томаса [2]. Значения $X_n^{(k+1)}$ получают

формулой $X_n^{(k+1)} = X_n^{(k)} + t \Delta X_n^{(k)}$ где $t=0,01-2$. Итерации (k) останавливаются, когда сумма квадратов функций (1), (2) и (3) для всех тарелок достигает заданную точность ϵ .

3. Заключение

Вышеизложенная модель имеет общее назначение и может быть применена при любом числе компонентов, реакций и боковых потоков. Балансы и уравнения равновесия не разлагают, и могут непосредственно участвовать как ограничения в градиентной оптимизации. Кроме того, матрицы A_j, B_j и C_j независимы друг от друга и могут быть рассчитаны параллельно, что позволяет ускорять процессы оптимизации.

Список литературы

1. Naphtali L.M., Sandholm D.P. // *AICHe J.*, 1971. – V.17. – №1. – P.148–153.
2. Seader J.D. Henley E.J. *Separation Process Principles.* – New Jersey: John Wiley & Sons Inc., 2006.

КАЛОРИМЕТРИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ОБРАЗОВАНИЯ И РАЗЛОЖЕНИЯ ВТОРИЧНЫХ ГИДРАТОВ ПРИРОДНОГО ГАЗА В ВОДОНЕФТЯНЫХ ЭМУЛЬСИЯХ ОБРАТНОГО ТИПА

Н.С. Горохова

Научный руководитель – м.н.с. В.В. Корякина

Северо-Восточный федеральный университет

677007, Россия, г. Якутск, ул. Кулаковского 42, NaryyaGorokhova@mail.ru

Известно, что месторождения газовых гидратов могут содержать примерно вдвое больше запасов ископаемого углерода, чем во всех источниках угля, нефти и природного газа вместе взятых [1], что делает их потенциально цен-

ным энергетическим сырьем. Процесс гидратообразования часто происходит и в техногенных системах, например, при добыче нефти и газа в месторождениях с низкими температурами, в том числе и на шельфах, а также при транспор-