

РАЗРАБОТКА СТРОГОЙ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ПРОМЫШЛЕННОГО ПРОЦЕССА ИЗОМЕРИЗАЦИИ ПРЯМОГОННЫХ БЕНЗИНОВЫХ ФРАКЦИЙ

Пушилин Е.А.¹, Санкина Я.Ю.², Чузлов В.А.³

¹ Томский политехнический университет, ИШПР, группа 2Д22, eap61@tpu.ru

² Томский политехнический университет, ИШПР, группа 2Д22, yys11@tpu.ru

³ Томский политехнический университет, ИШПР, доцент, chuva@tpu.ru

Введение

Изомеризация – один из важнейших процессов современной нефтепереработки, целевым назначением которого является получение высокооктановых изокомпонентов товарных бензинов или сырья нефтехимии [1]. Важно отметить, что продукт процесса каталитической изомеризации – изомеризат – характеризуется практически полным отсутствием в составе ароматических и серосодержащих соединений, т.е. может быть использован как экологически чистый компонент бензинов [2].

Вопросам разработки новых катализаторов, а также развитию математических моделей процесса изомеризации посвящено большое количество работ. Вместе с этим, актуальным остается вопрос об обеспечении максимальной эффективности указанного процесса. При эксплуатации промышленной установки изомеризации необходимо отслеживать ход процесса для поддержания экономической эффективности производства. Ввиду активной цифровизации ТЭК России, одним из возможных способов оптимизации технологических процессов является их моделирование и автоматизированное управление при помощи разработанного отечественного ПО [3].

Целью данной работы являлось создание математической модели реакторного блока и блока стабилизации низкотемпературной изомеризации легкой бензиновой фракции на языке программирования Python. Разработанная модель является основной для цифрового двойника промышленной установки изомеризации, который, в свою очередь, является инструментом для управления и поддержания эффективности промышленного процесса.

Описание алгоритма

Математическая модель состоит из двух принципиально разных частей – реакторного блока и блока стабилизации. Расчетная блок-схема представлена на рис. 1.

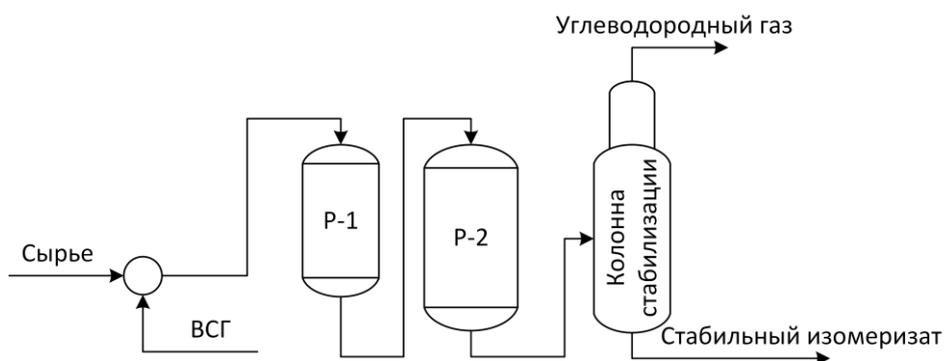


Рис. 1. Расчетная блок-схема процесса изомеризации

Сырьем реактора является прямогонная бензиновая фракция н.к.-62 °С. Сырье, предварительно пройдя стадию гидроочистки, подогревается до температуры процесса 140-160 °С [2] и поступает в реакторный блок. Продуктом является смесь изоалканов C₅-C₆ и некоторого количества продуктов побочных реакций. Далее продукт поступает в колонну стабилизации, с низа которой выводят изомеризат.

Математическое описание реакторного блока представляет собой систему дифференциальных уравнений материального и теплового балансов. В качестве реагирующих веществ были приняты не чистые, а групповые компоненты. Представленная модель учитывает не только реакции изомеризации нормальных алканов C₅-C₆, но и побочные реакции, протекающие в процессе, а также аналогичные реакции для минорных компонентов C₇-C₈ (рис. 2).

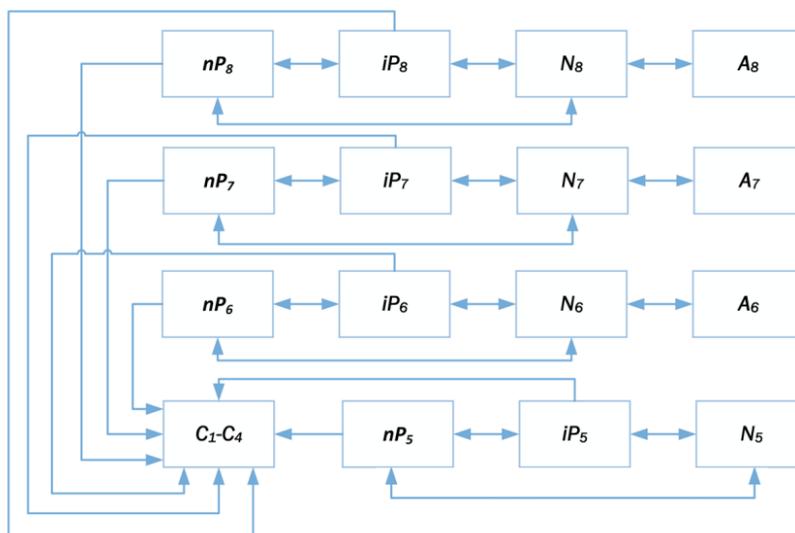


Рис. 2. Принципиальная схема превращений групповых компонентов
 nP_k – n -парафины, iP_k – изопарафины, N_k – нафтенны, A_k – арены (где k – число атомов углерода в молекуле),
 C_1-C_4 – метан-бутановая фракция

Кинетические уравнения для основных реакций изомеризации

$$\begin{aligned} \omega_1 &= k_1 \cdot c(nC_5) \\ \omega_2 &= k_2 \cdot c(nC_6), \end{aligned} \quad (1)$$

где ω_i – скорость реакции; k_i – константа скорости реакции; $c(nC_5)$ и $c(nC_6)$ – концентрации реагентов, моль/л.

Константы скорости реакций рассчитываются согласно уравнению Аррениуса

$$k_i = k_{i0} \cdot e^{\frac{-E_a}{RT}}, \quad (2)$$

где k_{i0} – предэкспоненциальные множители реакций; E_a – энергия активации реакции, Дж/моль; R – универсальная газовая постоянная, Дж/(моль·К); T – температура, К.

Блок стабилизации представлен математической моделью ректификационной колонны с ребойлером и конденсатором. Расчет составов дистиллята и кубового остатка (изомеризата) производится на основе уравнения Пенга-Робинсона.

Уравнение Пенга-Робинсона – модификация уравнения Ван-дер-Ваальса, рекомендованная к использованию для углеводородных сред [4]

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{v(v-b) + b(v-b)} \quad (3)$$

или же в полиномиальной форме

$$Z^3 + (B-1)Z^2 + (A-2B-3B^2)Z + (B^2 + B^3 - AB) = 0, \quad (4)$$

где P – давление, Па; T – температура, К; v – молярный объём, м³/моль; R – универсальная газовая постоянная, Дж/(моль·К); A , B – коэффициенты уравнения; a , b – коэффициенты уравнения Ван-дер-Ваальса, м³/моль; Z – коэффициент сжимаемости.

Для расчета фазового равновесия необходимо знать мольные доли z_i всех N компонентов смеси, а также давление и температуру системы. Первые приближения для констант фазового равновесия рассчитываются по формуле

$$K_i = \frac{P_{si}(T)}{P}, \quad (5)$$

где $P_{si}(T)$ – давление насыщенного пара i -го компонента при данной температуре, Па. Величина $P_{si}(T)$ может быть рассчитана по формуле Вильсона или по уравнению Антуана [4].

Для расчета составов паровой и жидкой фаз используется уравнение Рашфорда-Райса

$$F(V) = \sum_{i=1}^N \frac{z_i(K_i-1)}{V(K_i-1)+1} = 0, \quad (6)$$

где V – мольная доля паровой фазы, K_i – константа фазового равновесия i -го компонента.

Математическая модель простой ректификационной колонны базируется на уравнениях материального баланса, уравнениях фазового равновесия, баланса мольных долей и уравнений теплового баланса. Материальный баланс j -ой ступени можно представить следующим образом:

$$F_j + V_{j+1} + L_{j-1} - V_j - W_j - L_j - U_j = 0. \quad (7)$$

Массовый баланс по компоненту i для ступени j :

$$z_{ij}F_j + y_{ij}V_{j+1} + x_{ij}L_{j-1} - y_{ij}(V_j + W_j) - x_{ij}(L_j + U_j) = 0. \quad (8)$$

Глобально материальный баланс для i -го компонента можно записать в виде:

$$\sum_{j=1}^n z_{ij}F_j - \sum_{j=1}^n (y_{ij}W_j + x_{ij}U_j) = 0, \quad (9)$$

где x_{ij} – мольная доля i -го компонента в жидкости на j -ой ступени; y_{ij} – мольная доля i -го компонента в паре на j -ой ступени; z_{ij} – мольная доля i -го компонента в потоке питания j -ой ступени; F_j – расход питания на j -ую ступень; L_j – расход жидкости, покидающей j -ую ступень и поступающей на $j+1$ -ую ступень; V_j – расход пара, покидающего j -ую ступень и поступающей на $j-1$ -ую ступень; U_j – расход бокового отбора жидкости с j -ой ступени; W_j – расход бокового отбора пара с j -ой ступени.

Уточнение значений K_i происходит до тех пор, пока летучесть для каждого компонента паровой фазы не станет равна летучести того же компонента в жидкой фазе [5].

Верификация математической модели производилась при помощи построения графика рассеяния, отражающего разность между расчетными значениями концентраций компонентов и соответствующих им данных с производственной установки изомеризации (рис. 3). Общая ошибка модели составила 7,1 %.

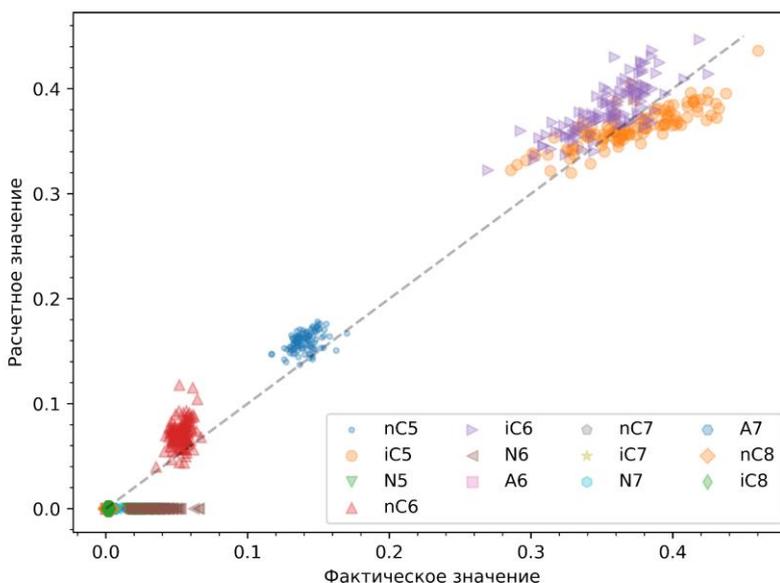


Рис. 3. Верификация разработанной модели

Заключение

В ходе исследования была разработана математическая модель реакторного блока и блока стабилизации низкотемпературной изомеризации легкой бензиновой фракции. Данную модель можно использовать для изучения влияния технологических параметров на основные показатели процесса, прогнозировать состав продукта и его физико-химические свойства, сравнивать различные способы организации технологического процесса между собой.

В ходе дальнейшей разработки в модель будут добавлены зависимости состава продукта от свойств используемого катализатора, а также технологии машинного обучения для создания программ-

ного продукта, способного проводить внутренние калибровки, а также анализ эффективности промышленного процесса с последующими рекомендациями по оптимальным параметрам технологического режима, при которых достигается экономическая эффективность промышленного производства.

Список использованных источников

1. Технология и оборудование процессов переработки нефти и газа: учебное пособие / С.А. Ахметов [и др.]. – СПб. : Недра, 2006. – 868 с.
2. Капустин В.М. Химия и технология переработки нефти: учебник / В.М. Капустин, М.Г. Рудин; Российский государственный университет нефти и газа им. И.М. Губкина (РГУ Нефти и Газы). – Москва : Химия, 2013. – 496 с.
3. Пять шагов к цифровизации энергетики // РБК Тренды : сайт. – URL: <https://trends.rbc.ru/trends/innovation/5d6796719a7947b5b36a5972> (дата обращения: 05.09.2024).
4. Николаев Е.В. Исследование сепарационных процессов углеводородных многокомпонентных систем в режимах функционирования оборудования предварительной подготовки нефти / Е.В. Николаев, С.Н. Харламов // Известия Томского политехнического университета. – 2016. – Т. 327, № 7. – С. 84–99.
5. Peng Ding-Yu, Robinson Donald N. Two and Three Phase Equilibrium Calculations for Systems Containing Water // The Canadian Journal of Chemical Engineering. – 1976. – Vol. 54. – P. 595–599.