


Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение
высшего образования
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
Институт нефти и газа
Базовая кафедра химии и технологии природных энергоносителей и
углеродных материалов

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой

 В. П. Твердохлебов


подпись

« 22 » 06 2016 г.

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

18.03.01 «Химическая технология»
Оптимизация установки изомеризации НПЗ

Научный руководитель  к. х. н., профессор В. П. Твердохлебов
подпись, дата

Выпускница  22.06.16г.
подпись, дата М. А. Коктева

Консультант по
экспериментальной части 
подпись, дата Н. В. Дерягина

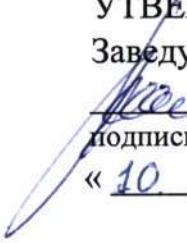
Нормоконтролер 
подпись, дата В. П. Твердохлебов

Красноярск 2016

Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение
высшего образования
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
Институт нефти и газа
Базовая кафедра химии и технологии природных энергоносителей и
углеродных материалов

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой

 В. П. Твердохлебов

подпись

« 10 » 05 2016 г.

**ЗАДАНИЕ
НА ВЫПУСКНУЮ КВАЛИФИКАЦИОННУЮ РАБОТУ
в форме бакалаврской работы**

Студентке: Коктевой Марине Алексеевне

Группа: НБ 12-08 Направление (специальность): 18.03.01

Химическая технология

Тема выпускной квалификационной работы: «Оптимизация установки изомеризации НПЗ»

Утверждена приказом по университету № 6141/с от 10.05.16

Руководитель ВКР: В. П. Твердохлебов, д. х. н., профессор

Исходные данные для ВКР: учебная и научная литература, интернет-ресурсы

Перечень разделов ВКР: Введение. 1 Литературный обзор. 2

Экспериментальная часть. Заключение. Список использованных источников.

Перечень графического материала: 11 слайдов Microsoft PowerPoint.

Руководитель ВКР



подпись

В. П. Твердохлебов

Задание приняла к исполнению



подпись

М. А. Коктева

« 10 » мая 2016 г.

РЕФЕРАТ

Дипломная работа по теме «Оптимизация установки изомеризации НПЗ» содержит 65 страниц текстового документа, 13 использованных источников, 30 формул, 18 таблиц, 16 рисунков в структуре документа.

ИЗОМЕРИЗАЦИЯ, СИМПЛЕКС-МЕТОД, ПОДГОТОВКА, СЫРЬЕ, ПРОДУКТЫ, ОПТИМИЗАЦИЯ, КАЧЕСТВО, ПРИМЕСИ, ОКТАНОВОЕ ЧИСЛО, ЛИНЕЙНОЕ ПРОГРАММИРОВАНИЕ, УРАВНЕНИЕ РЕГРЕССИИ, МОДЕЛЬ.

Цель работы - разработать оптимальный режим процесса изомеризации в условиях ОАО «АНПЗ ВНК» для получения высококачественного компонента моторного топлива.

Для решения сложной многофакторной задачи необходимо использовать математические модели, но построенные на физико-химической основе и сохраняющие чувствительность к изменению углеводородного состава перерабатываемого сырья и активности катализатора.

В результате работы получена математическая модель процесса изомеризации в условиях ОАО «АНПЗ ВНК», проведен регрессионный анализ. В ходе него проверена значимость коэффициентов уравнения регрессии и выявлена адекватность полученной модели.

Также проведена интерпретация результатов математического моделирования, по результатам которой было оценено влияние каждого фактора на параметр оптимизации и влияние факторов друг на друга. Определены факторы, благоприятно и неблагоприятно влияющие на режим процесса.

Оптимальный режим технологического процесса разрабатывался симплекс-методом. В результате проведенной оптимизации процесса изомеризации, на основе математической модели получено два оптимальных режима.

СОДЕРЖАНИЕ

Введение.....	4
1 Литературный обзор.....	5
1.1 Общая характеристика установки.....	5
1.2 Подготовка сырья.....	7
1.3 Описание процесса. Химизм.....	13
1.4 Анализ термодинамических данных.....	14
1.4.1 Формализация механизма реакции.....	14
1.4.2 Термодинамический расчет.....	19
1.4.3 Расчет равновесного состава в целевых реакциях.....	21
1.5 Анализ влияния технологических параметров на процесс низкотемпературной изомеризации.....	29
1.5.1 Влияние температуры.....	29
1.5.2 Влияние давления.....	31
1.5.3 Влияние объемной скорости подачи сырья.....	31
1.5.4 Мольное соотношение «водород : углеводороды».....	32
1.6 Моделирование процессов.....	32
1.6.1 Основные понятия и принципы моделирования.....	32
1.6.2 Понятие химической системы.....	34
1.6.3 Методы составления математического описания.....	35
1.6.4 Уравнение регрессии.....	36
1.6.5 Методы исследования математической модели.....	42
1.6.6 Проверка адекватности модели.....	43
1.6.7 Оптимизация математической модели.....	44
1.6.8 Методы поиска оптимума.....	49
1.6.9 Решение задач линейного программирования.....	50
2 Экспериментальная часть.....	51
2.1 Выбор объекта.....	51
2.2 Выбор критерия оптимальности.....	51
2.3 Расчет параметров модели, проведение симплекс-метода.....	51
2.4 Обсуждение результатов.....	61
Заключение.....	63
Список сокращений.....	64
Список использованных источников.....	65

ВВЕДЕНИЕ

На работу установки низкотемпературной изомеризации влияет множество эксплуатационных технологических параметров, которые оказывают воздействие на чистоту получаемых продуктов, на их выход, на потребление энергоносителей и т.д. Технологический регламент для данной установки можно использовать только как общее руководство, так как уменьшение расхода потоков, различия в конструкции оборудования и другие факторы могут (и будут) вызывать изменения этих технологических условий.

Основой научного подхода к исследованию и оптимизации технологических процессов является их математическое моделирование с последующим использованием моделей для анализа влияния основных факторов и вычисления оптимальных условий ведения процесса. Характерная особенность многих реальных технологических процессов как объектов моделирования и оптимизации – их зависимость от большого числа управляемых и неуправляемых факторов (температуры, продолжительности, состава реагентов, аппаратного оформления, свойств сырья и т.п.), многие из которых изменяются стохастически. Задачи исследования и оптимизации таких систем успешно решаются с помощью математической статистики.

Современная химическая промышленность выпускает несколько десятков тысяч наименований продуктов. В лаборатории разрабатываются сотни новых технологических процессов. Ставить задачу изучения механизма протекания всех этих процессов нереально, между тем задачу оптимизации и управления этими процессами решать необходимо. Для этих целей успешно применяются экспериментально – статистические методы, с помощью которых составляют математическую модель, при неизвестном механизме протекающих в объекте процессов, изучая зависимость отклика системы на изменения входов.

Описание технологических процессов намного проще проводить с помощью программирования. Цифровые вычислительные машины (ЦВМ) являются средством оптимального проектирования, оптимального управления большими системами и при моделировании больших систем. ЦВМ применяются при статическом анализе данных действующих производств, для определения характеристик управления и последующих оптимизационных исследований.

Компьютерное моделирование химико-технологических систем к настоящему времени полностью доказало свою актуальность и перспективность. С его помощью удастся повысить качество управления химико-технологическими процессами и эффективность работы технологической системы.

1 Литературный обзор

1.1 Общая характеристика установки

12 декабря 2007 г. в Ачинске на НПЗ введена в эксплуатацию установка изомеризации углеводородов С5-С6 с блоком гидроочистки. Применяется технология изомеризации «Penex». Процесс разработан фирмой «UOP» для изомеризации светлой нефти в 1958 г, где использован алюмоплатиновый катализатор.

Предусмотрена рециркуляция низкооктановых компонентов на вход реакторов изомеризации, что позволяет повысить октановое число целевого продукта до 93.

В состав установки включены следующие секции:

- секция 100 - предварительная гидроочистка сырья с блоком колонны деизопентанизации;

- секция 200 - изомеризация «Пенекс».

Секция 100 предназначена для выделения в колонне деизопентанизации изопентановой фракции и гидроочистки сырья для секции 200.

Секция 200 предназначена для получения изопарафинов с более высоким октановым числом путем изомеризации пентан-гексановой фракции, имеющей низкое октановое число.

В состав секции 100 – предварительная гидроочистка входят следующие блоки и узлы.

Блок колонны деизопентанизации – предназначен для выделения в колонне 100-Т-1 изопентановой фракции из сырья и получение деизопентанизованного сырья для блока гидроочистки.

Реакторный блок гидроочистки – предназначен для гидроочистки сырья установки от серосодержащих соединений в среде водородсодержащего газа.

Блок стабилизации гидрогенизата – предназначен для отпарки сероводорода, паров воды и углеводородных газов С1-С4 в отпарной колонне 100-Т-2.

Узел аммиачной и химочищенной воды для смыва аммонийных солей – предназначен для подачи воды в продукты реакции для снижения кислотности продуктов и растворения солей.

Блок очистки свежего водородсодержащего газа – предназначен для очистки от HCl свежего водородсодержащего газа на адсорбенте MOA-98 фирмы «Олкат».

Узел охлаждения насосов и компрессора – предназначен для циркуляции по замкнутой системе химочищенной воды для охлаждения

подшипников, электродвигателей и систем уплотнения насосов и компрессоров.

Узел подготовки топливного газа – предназначен для нагрева топливного газа и удаления из него конденсата и механических примесей.

Узел подачи раствора щелочи – предназначен для нейтрализации кислых газов при регенерации катализатора гидроочистки и нейтрализации HCl в газах стабилизации изомеризата.

В состав секции 200 – изомеризация «Пенекс» входят следующие блоки и узлы.

Блок осушки сырья и водородсодержащего газа – предназначен для осушки сырья и водородсодержащего газа от воды на адсорбентах на основе молекулярных сит фирмы «UOP».

Реакторный блок изомеризации – предназначен для получения нестабильного изомеризата на хлорированном катализаторе изомеризации при определенных условиях в водородной среде путем конверсии низкооктановых нормальных парафинов C5 / C6 в соответствующие изомеры.

Блок стабилизации изомеризата и очистки углеводородного газа от HCl – предназначен для отделения углеводородных газов C1-C4 от нестабильного изомеризата в колонне 200-T-1 и очистки углеводородного газа от HCl раствором щелочи в колонне 200-T-2.

Блок колонны деизогексанизации (ДИГ) – предназначен для выделения путем ректификации из стабильного изомеризата в колонне 200-T-3:

- изомеризата из верхней части колонны;
- гексановой фракции боковым погоном колонны, возвращаемой в сырье блока изомеризации;
- фракции C7+ из кубовой части колонны.

Узел подачи хлорорганики – предназначен для хлорирования катализатора, необходимого для оптимизации его активности.

Узел подачи воды – предназначен для промывки углеводородного газа от унесенной щелочи после нейтрализации газа от HCl.

На сегодняшний день используются катализаторы I-8, I-82, которые отличаются чрезвычайно высокой стабильностью и не требуют регенерации. Эти катализаторы обладают самой высокой изомеризирующей активностью для углеводородов C5 и C6, которая поддерживается непрерывным добавлением органического хлорида.

Необходимо тщательно уделить вопрос подготовки сырья. Жесткие требования по содержанию воды, ароматики, углеводородов C₇, олефинов, серы и азота.

Изомеризация приводит к получению соединения с иным расположением атомов или групп, но при этом не происходит изменение

состава и молекулярной массы соединения, процесс изомеризации направлен на получение высокооктановых компонентов товарного бензина из низкооктановых фракций нефти путем структурного изменения углеродного скелета [2].

Реакции изомеризации являются обратимыми и равновесными. Термодинамические расчеты показывают, что они могут протекать и при невысоких температурах (даже ниже комнатной) в присутствии катализаторов. И хотя эти реакции являются экзотермическими, их теплота составляет всего 6—8 кДж/моль. Кинетика и механизм реакции изомеризации в существенной мере зависят от применяемых катализаторов, которые можно разделить на две основные группы:

- кислотные — $AlCl_3$, $AlBr_3$ и некоторые хлориды других металлов с промоторами, в качестве которых используют олефины или алкилгалогениды; H_2SO_4 , H_3PO_3 и другие минеральные кислоты; кислые оксиды (Al_2O_3 , MoO_3) и сульфиды (MoS_2 , CoS);

- бифункциональные, состоящие из гидрирующе-дегидрирующего и кислотного компонентов (например, Pt/Al_2O_3); состоящие из металлов платиновой группы на носителе кислотного типа (оксид алюминия, алюмосиликат, цеолит).

1.2 Подготовка сырья

В качестве сырья на установке изомеризации используются пентан-гексановые фракции. Состав сырья оказывает существенное влияние на выход продукции, на эффективность действия катализатора. Для процесса «PENEX» требуется осушенное малосернистое сырьё. Основные составляющие (компоненты) сырья, влияющие на процесс изомеризации:

- воздействие олефинов, циклических соединений, углеводородов C_7+ и бутана;

- содержание в сырье примесей.

Количество и типы олефиновых углеводородов, содержащихся во фракции C_5/C_6 с установки риформинга, приемлемы, но потоки с высоким содержанием олефинов нельзя перерабатывать без предварительного гидрирования для насыщения этих компонентов. Вредное воздействие большого количества олефинов заключается в том, что они физически обволакивают катализатор после их полимеризации.

Циклические соединения адсорбируются на катализаторе, снижая количество активных центров для изомеризации парафинов.

При содержании бензола в исходном сырье более 5% масс. требуется дополнительный запас катализатора в реакторах. Насыщенные циклические углеводороды потребляют значительное количество водорода в результате протекания экзотермической реакции, которая нежелательна для равновесия процесса изомеризации. Бензол быстро гидрируется и затем ведет себя как

эквивалентное количество циклогексана. Циклогексан и другие нафтеновые углеводороды C_6 конвертируются в парафиновые углеводороды C_6 , что приводит к снижению октанового числа.

Углеводороды C_{7+} в сырье установки «PENEX» содержание углеводородов C_7 и выше не должно быть более 3% масс. Парафиновые углеводороды C_{7+} легко подвергаются гидрокрекингу с образованием углеводородов C_3 и C_4 . Некоторая часть углеводородов C_{7+} , которая не подверглась гидрокрекингу, изомеризуется с получением смеси углеводородов с более низким октановым числом по сравнению с продуктами, получаемыми из углеводородов C_5 и C_6 . Нафтеновые углеводороды C_7 оказывают такое же отрицательное воздействие, как и нафтеновые углеводороды C_6 .

Бутан и более легкие парафины проходят через реактор без изменений, т.к. являются инертными относительно каталитической реакции. Обычно содержание бутанов не должно превышать 4% об.

Присутствие в сырье серы приведёт к снижению активности катализатора. В этом случае для получения нужного соотношения продуктов необходима работа катализатора при более высокой температуре. После удаления серы, по методике удаления серы из катализатора, катализатор постепенно восстанавливает свою активность.

Необходимо также контролировать содержание в сырье примесей, являющихся ядом для катализатора. Ядами, необратимо отравляющими катализатор, являются соединения, которые оказывают на активность катализатора необратимое вредное воздействие. Для катализатора установки «PENEX» такими соединениями являются вода, соединения азота, фториды, кислородсодержащие соединения.

Вода или другие кислородсодержащие соединения. Деактивация катализатора в результате воздействия таких соединений необратима. Примерно один килограмм кислорода в любой форме будет деактивировать 100 кг катализатора. Кислородсодержащие соединения вступают в химическую реакцию с активным хлором на катализаторе, который химически связан со структурой окиси алюминия во время производства катализатора [2].

Соединения азота реагируют с хлоридом в катализаторе или с HCl , содержащимся в рециркулирующем газе, с образованием солей, которые могут необратимо деактивировать катализатор: заблокировать активные центры катализатора, привести к потере хлоридов или к нарушению распределения потока из-за отложения солей.

Соединения фтора также являются ядом, который отравляет катализатор необратимо. Приблизительно один килограмм этого соединения будет деактивировать 100 кг катализатора.

Катализатор может противостоять воздействию лишь определенного количества этих примесей, при превышении которого катализатор необратимо деактивируется и подлежит замене. Характеристика исходного сырья представлена в таблице 1.1.

Таблица 1.1 – Характеристика исходного сырья

Наименование сырья	Показатели качества, подлежащие проверке	Норма по ГОСТ, ОСТ, СТП, ТУ
Газовый бензин. Фракция C ₅₊ (куб колонны К-402)	Плотность при 20°C, кг/м ³	не более 670
	Углеводородный состав, % масс., содержание:	
	С1 – С3	отс.
	∑ изобутана и н-бутана, не более	3,0
	∑ изопентана и н-пентана	не нормир.
	∑ С6 и выше, не более	56
	Фракционный состав - температура НК, °С, не ниже	32
	Содержание мех. примесей	отс.
	Содержание, не более:	
	-серы, ppm масс.	50
	-азота, ppm масс.	0,5
	-растворенной влаги, ppm масс., не более	50
	-сероводорода	отс.
	Медная пластина	выдерж.
	Октановое число, ИМ	не нормир.
Медная пластинка	выдерж.	
Плотность при 20°C, кг/м ³	не нормир.	
Углеводородный состав, % масс., содержание:		
- парафиновых, не менее	55	
- ∑ нафтеновых, не более	35	
-∑ароматических, не более	2,0	
Октановое число, ИМ, ММ	не нормир.	

Продолжение таблицы 1.1

Наименование сырья	Показатели качества, подлежащие проверке	Норма по ГОСТ, ОСТ, СТП, ТУ
<p>Боковой погон К-104 (бензиновая фракция 35-110)</p>	<p>Плотность при 20°С, кг/м³</p> <p>Углеводородный состав, % масс., содержание: - парафиновых, не менее - ∑ нафтеновых, не более - ∑ ароматических, не более</p> <p>Октановое число, ИМ, ММ</p> <p>Давление насыщенных паров при 20°С, кПа (абс.)</p> <p>Цвет</p> <p>Фракционный состав, °С НК, не ниже 10 % перегоняется, не выше 50% перегоняется, не выше 90% перегоняется, не выше КК, не выше</p> <p>Медная пластинка</p>	<p>не нормир.</p> <p>55 35 2,0</p> <p>не нормир.</p> <p>не нормир.</p> <p>Бесцветная прозрачная жидкость</p> <p>35 70 80 90 120</p> <p>выдерж.</p>
<p>Стабильный гидрогенизат</p>	<p>Плотность при 20°С, кг/м³</p> <p>Допустимое содержание, % масс: - бензола - С7+ - бутанов</p> <p>Содержание - серы, ppm не более - сероводорода, % об. - азота, ppm масс. - хлоридов, ppm масс. - влаги, ppm масс.</p>	<p>640-670</p> <p>до 2,0 до 3,0 до 2,0</p> <p>0,5 0,0001 до 0,1 до 2,0 до 20</p>

Продолжение таблицы 1.1

Наименование сырья	Показатели качества, подлежащие проверке	Норма по ГОСТ, ОСТ, СТП, ТУ
Риформат колонны К-202 (Боковой погон К-202)	Плотность при 20°C, кг/м ³ , не более Углеводородный состав, % об., содержание: -ароматических, не более, в т.ч. бензола, не более -остаточных нафтеновых, до -парафиновых, до в том числе изопарафиновых -олефинов Содержание хлора (органич.), ppm, не более Октановое число, ММ, не менее Содержание воды и мех. примесей Фракционный состав, °С: НК, не ниже 50% перегоняется, не выше КК, не выше Давление насы- щенных паров при 20°C, кПа (абс.)	710 40 25 7 90 60 0 - 1,5 1,0 70 отс. 26/35 90 135 не нормир.
Свежий водородсодержащий газ	Плотность, кг/м ³ Углеводородный состав, %об., в т.ч. водород Содержание, ppm об.: - HCl, до очистки после очистки - Вода, до осушки после осушки - H ₂ S - Азот	0,2 – 0,4 76 – 90 0 – 5 отс. 20-35 до 0,1 до 1 до 1

Окончание таблицы 1.1

Наименование сырья	Показатели качества, подлежащие проверке	Норма по ГОСТ, ОСТ, СТП, ТУ
Сырье блока гидроочистки	Плотность при 20°C, кг/м ³ Допустимое содержание, % масс: - бензола - C7+ Фракционный состав, °C -НК, не ниже -КК, не выше Содержание - серы, ppm - азота, ppm - хлора, ppm	650-675 до 2,0 до 3,0 36 80 до 50 до 3,5 до 6,0
Сырье блока изомеризации	Плотность при 20°C, кг/м ³ Углеводородный состав, % масс., содержание: -бутанов, не более -олефинов, не более -бензола, не более - C7+, не более Содержание: - Серы, ppm масс. - Азота, ppm масс. - Воды, ppm до осушки после осушки - Хлоридов, ppm - Кислородсодержащих, ppm - Свинца и других тяжелых металлов, ppb - Мышьяка, ppb - Меди, ppb - Фторидов, ppm - Кислорода растворенного, ppm масс. Бромное число, г/л	640÷675 4,0 2,0 5,0 3,0 до 0,5 до 0,1 по насыщ. до 0,1 0,0÷0,5 до 10 до 10 до 1 до 20 до 0,5 0 до 4

Наилучшей подготовкой сырья к процессу изомеризации является его гидрогенизационное облагораживание – гидроочистка. Этим процессом из состава сырья удаляются нежелательные компоненты.

1.3 Описание процесса. Химизм

Изомеризация парафинов на бифункциональных катализаторах протекает по механизму, который предусматривает участие в реакции как металлических, так и кислотных центров катализатора. Схему изомеризации парафинов можно представить следующим образом:

- н-парафин \rightarrow н-олефин + H_2 ;
- н-олефин \rightarrow изо-олефин;
- изо-олефин + $H_2 \rightarrow$ изо-парафин.

Изомеризация на кислотных катализаторах протекает через стадии образования из углеводорода RH карбениевых R^+ (катализаторы с кислотными центрами средней силы) или карбониевых RH_2^+ (сверхкислоты) ионов. Карбониевые ионы переходят в карбениевые с выделением водорода, далее ионы изомеризуются, переходя от менее устойчивых с зарядом на первичном атоме C к более устойчивым вторичным и затем третичным; последние превращаются в изомеры в результате отрыва гидрид – иона от углерода. Наличие металлических центров приводит к диссоциативной адсорбции углеводорода с образованием промежуточной циклической структуры; поверхностные циклические соединения сохраняют «новую» и разрывают одну из «старых» $C - C$ связей, образуя изомер.

Кроме реакций изомеризации парафинов протекает еще несколько других важных реакций, в том числе:

- размыкание колец нафтеновых соединений;
- изомеризация нафтенов;
- насыщение бензола;
- гидрокрекинг.

В сырье обычно присутствуют три нафтеновых соединения: циклопентан (ЦП), метилциклопентан (МЦП) и циклогексан (ЦГ). При размыкании колец эти соединения гидрируются с образованием парафиновых углеводородов. Протекание реакций размыкания колец ускоряется при повышении температуры в реакторе. Для типичных условий в реакторе установки изомеризации глубина превращения при размыкании нафтеновых колец с образованием парафиновых углеводородов составляет около 20-40 %.

Нафтеновые углеводороды метилциклопентан (МЦП) и циклогексан (ЦГ) находятся в равновесии. По мере повышения температуры реакция изомеризации нафтенов смещается в сторону образования метилциклопентана [4].

Катализатор обеспечивает насыщение бензола с образованием циклогексана. Эта реакция протекает очень быстро и при очень низких температурах. Насыщение бензола не ограничено достижением условий равновесия в реакторе изомеризации, и глубина превращения должна составлять 100%. При протекании реакций насыщения бензола выделяется

тепло. Количество выделяющегося при протекании этой реакции тепла ограничивает допустимое содержание бензола в сырье. Допустимое содержание бензола в сырье до 5% масс. Функция насыщения бензола в катализаторе изомеризации обеспечивается платиной.

Степень превращения при гидрокрекинге зависит от качества сырья и жесткости эксплуатационного технологического режима. Крупные молекулы, такие, как C_7 , легче подвергаются гидрокрекингу по сравнению с более мелкими молекулами. Парафины C_5 и C_6 также в некоторой степени подвергаются гидрокрекингу. По мере приближения к равновесию изомеризации парафинов C_5/C_6 , степень гидрокрекинга увеличивается. Если изомеризация протекает слишком интенсивно, в результате протекания реакций гидрокрекинга снижается выход жидких продуктов и увеличивается выделение тепла. В результате протекания реакций гидрокрекинга образуется метан, этан, пропан и бутан.

1.4 Анализ термодинамических данных

Обычно в процессах изомеризации нормальных парафиновых углеводородов степень превращения *n*-пентана и *n*-гексана ограничивается равновесием реакции. Поэтому для определения эффективности процесса изомеризации в ОАО «АНПЗ ВНК» на этапе 2 «Сбор и анализ данных по качеству сырья и продуктов, технологическому режиму установки изомеризации в отчетном периоде январь – май 2010» необходим термодинамический расчет равновесного состава изомеров при различных технологических условиях, предшествующий определению текущего состояния катализатора, анализу возможных вариантов оптимизации параметров процесса для увеличения глубины реакций изомеризации и повышения выхода изомеризата.

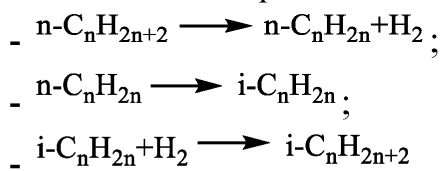
Термодинамические расчеты представляют собой один из первых и обязательных этапов изучения химического процесса. Результаты этих расчетов используют для определения теплот реакций и равновесных составов, выбора термодинамически благоприятных условий проведения процесса.

1.4.1 Формализация механизма реакции

Анализ данных компонентного углеводородного состава сырья и продукции установки позволил формализовать механизм превращения реагентов и учитывать те реакции, которые оказывают наибольшее влияние на выход продукта (брутто-реакции).

Процесс формализации начинается с анализа механизма и термодинамических расчетов вероятности протекания реакций по величине свободной энергии Гиббса.

В процессе изомеризации на стационарном слое катализатора I-82 (I-8 Плюс) фирмы UOP происходит перегруппировка молекулярной структуры нормальных парафинов в их изомеры с более высоким октановым числом. Изомеризация парафинов на бифункциональных катализаторах протекает по механизму, который предусматривает участие в реакции как металлических, так и кислотных центров катализатора согласно следующей схеме:



В качестве металлического компонента бифункционального катализатора I-82 используется платина, а в качестве носителя - хлорированный оксид алюминия. На начальной стадии происходит дегидрирование н-парафина на металлических центрах (м.ц.) катализатора, представленное на рисунке 1.1.

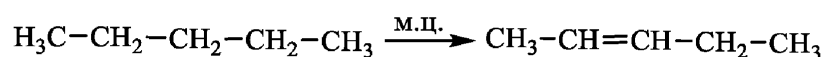


Рисунок 1.1 – Дегидрирование н-парафина на металлических центрах катализатора

Образовавшийся олефин на кислотном центре (к.ц.) катализатора превращается в карбоний-ион, который легко изомеризуется. Реакция показана на рисунке 1.2.

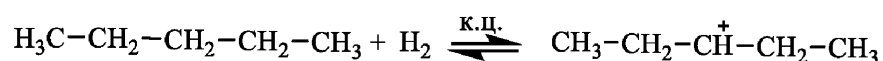


Рисунок 1.2 – Превращение олефина в карбоний-ион

Изомеризация карбониевых ионов представлена на рисунке 1.3. Может происходить либо путем передачи протона (гидридный сдвиг), либо метильной группы (скелетная изомеризация) вдоль углеводородной цепи:

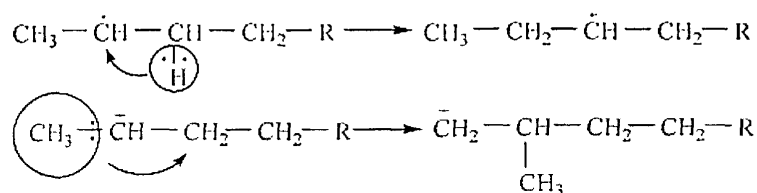


Рисунок 1.3 – Изомеризация карбониевых ионов

На металлических центрах катализатора I-82 адсорбируются большие количества водорода. Кроме того, металлы адсорбируют молекулы олефинов, взаимодействуя с электронами их двойных связей. Вероятно, связь Н-Н в молекуле водорода значительно ослаблена в результате адсорбции молекулы Н₂ на поверхности металлических центров. По этой причине можно рассматривать каталитическую гидрогенизацию как реакцию радикального присоединения.

Двойная связь в олефинах также до некоторой степени ослаблена, и ее электроны становятся более доступными в том случае, когда олефин адсорбирован на поверхности металла.

Таким образом, возникает ситуация, когда молекула олефина, адсорбированная в активированном состоянии на поверхности металла-катализатора, сближается с атомами водорода, расположенными в более глубоких слоях металла-катализатора.

Реагирующие частицы фиксируются вместе на матрице до тех пор, пока между ними происходит реакция; образующаяся молекула парафина, не имеющая доступных электронов, не сорбируется металлом, поэтому отделяется от поверхности катализатора, освобождая место для адсорбции следующей молекулы олефина. Эта десорбция гидрированного продукта с реакционного участка очень важна, поскольку только очень небольшая часть общей поверхности катализатора имеет достаточную активность для влияния на гидрогенизацию.

Это можно объяснить тем, что расстояния между атомами металлов в кристаллах катализатора I-82 очень изменчивы, и только в том случае, когда эти расстояния соизмеримы с длиной связи С=С (или Н-Н), кристалл металла-катализатора содержит активный участок.

На кислотных центрах возможно также протекание реакции по схеме, представленной на рисунке 1.4.

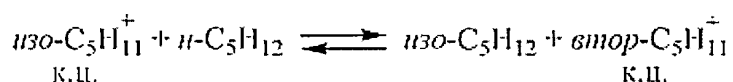


Рисунок 1.4 – Протекание реакции на кислотных центрах

Помимо парафинов изомеризации подвергаются другие классы углеводородов. В соответствии с анализом сырья и продукции блока изомеризации ОАО «АНПЗ ВНК», рассмотрим основные схемы превращений, которые показаны на рисунках 1.5, 1.6, 1.7, 1.8.

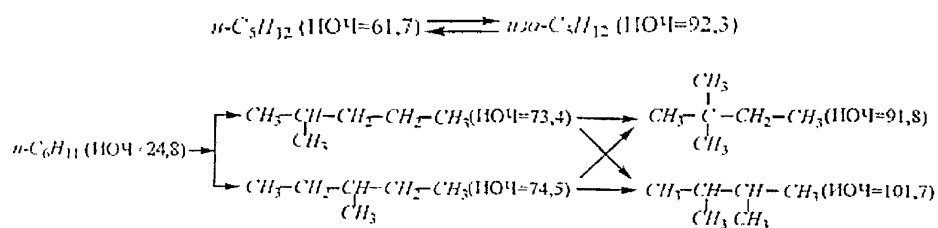


Рисунок 1.5 – Изомеризация парафинов

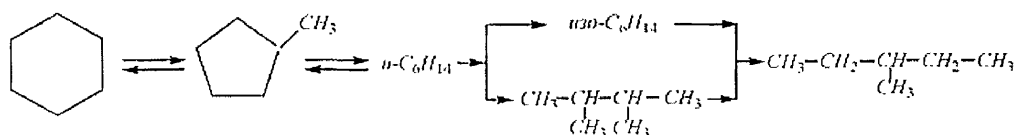


Рисунок 1.6 – Превращения нафтенов

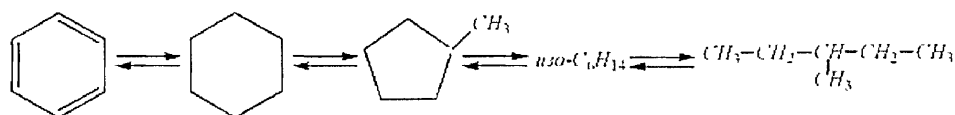


Рисунок 1.7 – Превращения бензола

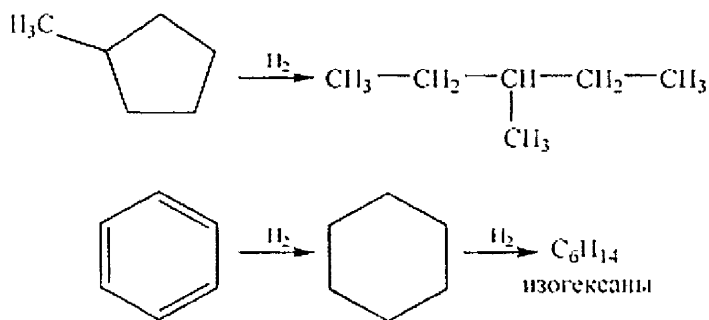


Рисунок 1.8 – Гидрирование нафтеных и ароматических УВ

Учет в модели детального механизма реакций изомеризации, включающего все промежуточные стадии и промежуточные вещества, в условиях ОАО «АНПЗ ВНК», не возможен, так как в используемых данных хроматографического анализа сырья и продуктов процесса отсутствуют данные по промежуточным соединениям, образующимся в реакторах, а также отсутствует возможность анализа проб непосредственно в реакторах изомеризации 200-R-1В (ведущий) и 200-R-1А (ведомый).

На основании выше указанного ограничения принята схема превращений, в которой компоненты фракции C₅-C₆ представлены индивидуально, а компоненты фракции C₇₊ – агрегированным соединением

(реакционной серией, которая объединяет 2,2-диметилпентан, 3-метилгексан и другие).

Таким образом, для выполнения термодинамического расчета реакций установки изомеризации ОАО «АНПЗ ВНК» составлена схема превращений.

Реакции изомеризации:

- $n\text{-C}_4\text{H}_{10} = i\text{-C}_4\text{H}_{10}$;
- $n\text{-C}_5\text{H}_{12} = i\text{-C}_5\text{H}_{12}$;
- $n\text{-C}_6\text{H}_{16} = 2\text{-МП}$;
- $n\text{-C}_6\text{H}_{16} = 3\text{-МП}$;
- $2\text{-МП} = 3\text{-МП}$;
- $2\text{-МП} = 2,3\text{-ДМБ}$;
- $2,3\text{-ДМБ} = 2,2\text{-ДМБ}$;
- $n\text{-C}_7\text{H}_{16} = i\text{-C}_7\text{H}_{16}$;
- ЦГ = МЦП.

Реакции гидрокрекинга:

- $\text{C}_2\text{H}_6 + \text{H}_2 = \Gamma$;
- $\text{C}_3\text{H}_8 + \text{H}_2 = \Gamma$;
- $\text{C}_4\text{H}_{10} + \text{H}_2 = \Gamma$;
- $i\text{-C}_4\text{H}_{10} + \text{H}_2 = \Gamma$;
- $\text{C}_5\text{H}_{12} + \text{H}_2 = \Gamma$;
- $i\text{-C}_5\text{H}_{12} + \text{H}_2 = \Gamma$;
- $\text{C}_6\text{H}_{14} + \text{H}_2 = \Gamma$;
- $2\text{-МП} + \text{H}_2 = \Gamma$;
- $3\text{-МП} + \text{H}_2 = \Gamma$;
- $2,3\text{-ДМБ} + \text{H}_2 = \Gamma$;
- $2,2\text{-ДМБ} + \text{H}_2 = \Gamma$;
- $\text{C}_7\text{H}_{16} + \text{H}_2 = \Gamma$;
- $i\text{-C}_7\text{H}_{16} + \text{H}_2 = \Gamma$.

Реакции дегидроциклизации:

- $n\text{-C}_6\text{H}_{14} = \text{ЦГ} + \text{H}_2$;
- $2\text{-МП} = \text{МЦП} + \text{H}_2$;
- $3\text{-МП} = \text{МЦП} + \text{H}_2$;
- $2,3\text{-ДМБ} = \text{МЦП} + \text{H}_2$;
- $2,2\text{-ДМБ} = \text{МЦП} + \text{H}_2$;
- $\text{C}_7\text{H}_{16} = z\text{-C}_7\text{H}_{14} + \text{H}_2$;
- $i\text{-C}_7\text{H}_{16} = z\text{-C}_7\text{H}_{14} + \text{H}_2$.

Реакции дегидрирования нафтенов:

- $\text{ЦГ} = \text{БЗ} + 3\text{H}_2$;
- $\text{МЦП} = \text{БЗ} + 3\text{H}_2$.

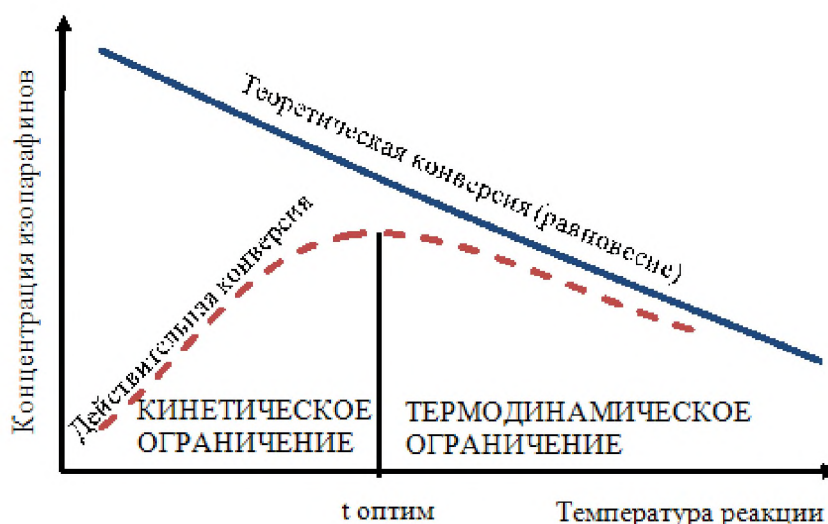


Рисунок 1.15 – Зависимость конверсии n-парафинов от температуры реакции

Поскольку энергетический и энтропийный факторы действуют, по существу, в противоположных направлениях, то именно их комплексное рассмотрение и исследование взаимовлияния позволит при выполнении работы «Мониторинг работы установки изомеризации и оценка состояния катализатора процесса изомеризации ОАО «АНПЗ ВНК» получить рекомендации для оптимизации состава сырья и технологических параметров процесса изомеризации.

1.5 Анализ влияния технологических параметров на процесс низкотемпературной изомеризации

1.5.1 Влияние температуры

Температура ввода газосырьевой смеси в реакторы является основным регулирующим параметром процесса.

Существует определенный верхний предел для количества изопарафинов, которое может находиться в продуктах реактора при любой заданной температуре на выходе из реактора. Это равновесная величина, которая диктуется законами термодинамики и может быть достигнута только через бесконечно большой период времени, то есть в бесконечно большом реакторе. Поэтому на практике концентрация изопарафинов в продукте будет ниже их равновесной концентрации. При увеличении температуры в реакторе с целью увеличения глубины реакций изомеризации состав продуктов должен сильнее приближаться к равновесному составу. В действительности при чрезмерно высоких температурах концентрация парафинов в продукте будет снижаться из-за смещения вниз на равновесной

кривой, несмотря на то, что при более высокой температуре реакции протекают с более высокой интенсивностью.

Использование более высоких температур, чем это необходимо для целесообразной степени приближения к равновесию, не приведет ни к чему другому, кроме увеличения интенсивности гидрокрекинга [8].

Чрезмерное повышение температур может привести к увеличению скорости отложения кокса на катализаторе. Однако предрасположенность катализатора к образованию кокса по существу настолько низка, что обычно до того, как возникают проблемы с образованием кокса, сталкиваются с чрезмерным гидрокрекингом.

На установке «PENEX» имеются два соединенных последовательно реактора, в которых предусмотрено независимое регулирование температуры. В системе первого реактора протекает большая часть реакций изомеризации, подвергается гидрированию весь содержащийся в сырье бензол, происходит конверсия с разрывом колец некоторого количества циклогексана и метилциклопентана с образованием гексанов, а также частично реакции гидрокрекинга углеводородов C_7 с образованием углеводородов C_3 и C_4 . Эти три реакции (гидрирование бензола, разрыв колец нафтеновых углеводородов с образованием гексанов и гидрокрекинг углеводородов C_7) экзотермичны и при переработке типового сырья они вносят большой вклад в рост температуры в первом реакторе, чем реакции изомеризации парафиновых углеводородов, которые также экзотермичны.

Обычно система первого реактора будет работать при таких температурах, при которых обеспечивается увеличение до максимума содержания изопентана и 2,2-диметилбутана в выходящем из реактора потоке. Достижимые концентрации и требуемая температура на выходе из реактора будут зависеть от имеющегося количества активного катализатора и от количества циклических углеводородов C_6 и углеводородов C_7 и более тяжелых, содержащихся в сырье. Чем выше концентрация таких компонентов в сырье, тем более высокие температуры требуются. При использовании такой методики требуемая рабочая температура в системе второго реактора снижается, и она может работать при условиях, которые больше способствуют достижению равновесия.

Хотя температура в системе первого реактора обычно выбирается без учета содержания изомеров в конечном кубовом продукте колонны стабилизации, существует возможность их воздействия друг на друга, которые должны учитываться для обеспечения оптимальной работы установки в целом, и количественные взаимозависимости будут изменяться по мере старения катализатора. При условии, что должен быть получен конечный продукт с таким же высоким содержанием изопентана и 2,2-диметилбутана (после оптимизации температуры во втором реакторе),

первый реактор лучше эксплуатировать с более низким содержанием изопентана и 2,2-диметилбутана в продукте, поскольку это подразумевает более низкую температуру в первом реакторе и, следовательно, чуть менее интенсивное протекание реакций гидрокрекинга и соответственно более высокий выход жидких продуктов. Возникновение такой ситуации более вероятно на ранних стадиях пробега установки, когда весь катализатор свежий.

Второе взаимное воздействие может происходить при работе на сырье с высоким содержанием циклических углеводородов C_6 . Поскольку для этих продуктов характерна тенденция снижения глубины изомеризации парафинов, может быть целесообразно подавать в первый реактор сырье с более высоким содержанием циклических углеводородов C_6 , выбирая такую температуру в первом реакторе, которая позволяет регулировать количество циклических углеводородов, входящих во второй реактор.

При повышении температуры в первом реакторе в гексаны может быть конвертировано большее количество циклических углеводородов и, следовательно, увеличена степень изомеризации во втором реакторе.

1.5.2 Влияние давления

Давление - основной, наряду с температурой, регулируемый параметр, оказывающий существенное влияние на выход и качество продуктов изомеризации.

Установка «PENEX» по изомеризации углеводородов C_5/C_6 обычно работает при избыточном давлении в продуктовом сепараторе до 3,15 МПа. В некоторых случаях, например, при реконструкциях других установок под процесс «PENEX» давление в сепараторе может быть снижено до 2,1 МПа.

Метилциклопентан и циклогексан адсорбируется на катализаторе и снижают скорость протекания реакций изомеризации. Работа при более высоком давлении помогает ослабить такое влияние циклических соединений C_6 .

Снижение давления на установке или работа при чуть более низком уровне давления не окажет влияния на срок службы катализатора, но повлияет на степень изомеризации [8].

1.5.3 Влияние объемной скорости подачи сырья

Объемная скорость подачи сырья на катализатор определяет глубину превращения сырья и получение изомеризата заданной октановой характеристики.

Объемной скоростью называют отношение объема жидкого сырья, подаваемого в реактор за один час, к объему катализатора. Объемная скорость измеряется в $\text{м}^3/\text{м}^3 \text{ час}$ или час^{-1} .

Объемная скорость оказывает влияние на качественные характеристики продукта [3].

Расчетная объемная скорость для эксплуатации установки «PENEX» при использовании в качестве сырья углеводородов C_5/C_6 составляет от 1 до 2 час^{-1} .

Увеличение объемной скорости приведет к получению продукта с меньшим содержанием углеводородов изостроения.

1.5.4 Мольное соотношение «водород: углеводороды»

Мольное соотношение определяется как количество молей водорода на количество молей подаваемого в реактор сырья.

В зависимости от типа перерабатываемого сырья на установке «Пенекс» принято расчетное соотношение водород : сырье равное 1-2 : 1.

Главной задачей поддержания этого соотношения равным расчетному или на уровне выше расчетного является поддержание в системе реакторов паровой фазы. В случае необходимости для поддержания расчетного соотношения «водород/углеводороды» нужно уменьшить скорость подачи сырья в реактор. Режим работы при слишком низкой циркуляции водорода может привести к усилению коксообразования или неправильному распределению потока в реакторах [2].

1.6 Моделирование процессов

1.6.1 Основные понятия и принципы моделирования

Процессы химической технологии имеют двойственную детерминированно-стохастическую природу. Они протекают в аппарате с конкретными геометрическими характеристиками, оказывающими, в свою очередь, влияние на характер этого процесса. Проявляется это в наложении стохастических особенностей гидродинамической обстановки в аппарате на процессы массо-, теплопереноса и химического превращения. А объясняется это случайным взаимодействием составляющих компонентов фаз или случайным характером геометрии граничных условий в аппарате.

Характеризуются такие системы чрезвычайно сложным взаимодействием составляющих их фаз и компонентов, вследствие чего изучение их с позиций классических детерминированных законов переноса и сохранения становится невозможным.

Изучают химико-технологические процессы методом математического моделирования, который базируется на стратегии системного анализа, а ее сущность заключается в представлении процесса как сложной взаимодействующей иерархической системы с последующим качественным анализом ее структуры, разработкой математического описания и оценкой неизвестных параметров. Выделяют пять уровней иерархии эффектов:

- совокупность явлений на атомарно-молекулярном уровне;
- эффекты в масштабе надмолекулярных или глобулярных структур;
- множество физико-химических явлений, связанных с движением единичного включения дисперсной фазы, с учетом химических реакций и явлений межфазного энерго- и массопереноса;
- физико-химические процессы в ансамбле включений, перемещающихся в сплошной фазе;
- совокупность процессов, определяющих макрогидродинамическую обстановку в масштабе аппарата. Такой подход позволяет наиболее полно установить совокупность явлений всего процесса и связей между ними.

Под математическим моделированием понимают изучение свойств объекта математической модели, целью которого является определение оптимальных условий протекания процесса, управление им на основе математической модели и перенос результатов на объект.

Основным понятием метода математического моделирования является понятие математической модели. Математической моделью называется приближенное описание какого-либо явления или процесса внешнего мира, выраженное с помощью математической символики.

Математическое моделирование включает три взаимосвязанных этапа:

- составление математического описания изучаемого объекта;
- выбор метода решения системы уравнений математического описания и реализация его в форме моделирующей программы;
- установление соответствия (адекватности) модели объекту.

Предварительно выделяют основные явления и элементы в объекте и затем устанавливают связи между ними, после чего для каждого выделенного элемента и явления записывают уравнение (или систему уравнений), отражающее его функционирование. Математическое описание может быть представлено в виде системы алгебраических, дифференциальных, интегральных и интегродифференциальных уравнений.

На этапе выбора метода решения и разработки моделирующей программы выбирается наиболее эффективный метод решения из имеющихся и реализация его сначала в форме алгоритма решения, а затем — в форме программы, которая будет пригодна для расчёта на ЭВМ.

Построенная на основе физических представлений модель должна быть адекватна моделируемому процессу. Для проверки адекватности

математической модели реальному процессу нужно сравнить результаты измерений на объекте в ходе процесса с результатами предсказания модели в идентичных условиях. Этот этап является заключительным.

В модели должны быть учтены все наиболее существенные факторы, которые оказывают влияние на процесс, а также она не должна быть загромождена множеством мелких, второстепенных факторов. В зависимости от степени полноты математического описания выделяют два случая:

- известны полная система уравнений, описывающая все основные стороны моделируемого процесса, и все числовые значения параметров этих уравнений;

- полное математическое описание процесса отсутствует [5].

Эмпирические модели объектов и процессов представляют собой результат обработки экспериментальных данных о поведении объекта или процесса методами математического статистического анализа. Очень часто для построения моделей объектов по результатам экспериментальных исследований используют математический аппарат регрессионного и корреляционного анализа. Термины «регрессия» и «корреляция» были введены в широкое употребление статистиками Ф. Гальтоном и К. Пирсоном в конце XIX в.

1.6.2 Понятие химической системы

Одно из важнейших понятий современной науки – система. Возникнув в кибернетике, оно приобрело статус философской категории – настолько широко и общее его применение.

Система – это совокупность элементов, отличающаяся двумя особенностями. Во-первых, сущность системы невозможно понять, рассматривая только свойства отдельных элементов. Для системы существенен способ взаимодействия элементов, выраженный в ее структуре. Во-вторых, система функционирует обязательно во взаимодействии с окружающим миром. Без понимания этого взаимодействия также невозможно понять ее сущность. По сути, любой объект природы и общества является системой. И в научном анализе чрезвычайно важно это учитывать. Важен системный подход.

Элементами химико-технологического процесса являются проходящие в нем процессы: химические реакции, тепло- и массообмен, движение фаз и другие. Системный подход к химической технологии связан с пониманием того, что анализ этих процессов, производимый порознь, не дает еще возможности судить обо всем процессе в целом. Поэтому при анализе химико-технологического процесса особое внимание следует обращать на взаимодействие составляющих его элементов.

В настоящее время при анализе и синтезе сложных систем получил развитие системный подход. Он предполагает последовательный переход от общего к частному, когда в основе рассмотрения лежит цель, причем исследуемый объект выделяется из окружающей среды. Важным для системного подхода является определение структуры системы — совокупности связей между элементами системы, отражающих их взаимодействие.

Современный подход к решению задач химической технологии основан на принципах системного анализа и синтеза. Это означает, что химико-технологический процесс рассматривается как сложная система, состоящая из элементов различных уровней детализации, начиная от молекулярного и кончая отдельными процессами. Элементы системы, характеризующие процессы химического превращения, диффузионного, конвективного и турбулентного переноса вещества, т.е. явления на молекулярном уровне, а также явления коалесценции и диспергирования, распределения материальных и энергетических потоков и т.д., иерархически взаимосвязаны между собой в соответствии с физической реализацией процесса [5].

1.6.3 Методы составления математического описания

К указанным методам относятся аналитический, экспериментальный и экспериментально-аналитический.

Аналитическими методами составления математического описания обычно называют способы вывода уравнений статики и динамики на основе теоретического анализа физических и химических процессов, происходящих в исследуемом объекте, а также на основе заданных конструктивных параметров аппаратуры и характеристик перерабатываемых веществ. При выводе этих уравнений используются фундаментальные законы сохранения вещества и энергии, а также кинетические закономерности процессов переноса массы и теплоты, химических превращений.

Для составления математического описания с помощью аналитических методов не требуется проведения каких-либо экспериментов на объекте, поэтому такие методы пригодны для нахождения статических и динамических характеристик вновь проектируемых объектов, физико-химические процессы в которых достаточно хорошо изучены.

Параметры (коэффициенты) составленных уравнений функционально зависят от определяющих размеров химико-технологического аппарата (диаметра, длины и т.д.), свойств обрабатываемых веществ и величин, характеризующих протекание физико-химических процессов (констант скорости реакций, коэффициентов диффузии и др.). Некоторые параметры уравнений могут быть определены расчетным путем, другие находятся с помощью принципа подобия по результатам ранее выполненных исследований.

К недостаткам аналитических методов составления математического описания можно отнести сложность решения получающейся системы уравнений при достаточно полном описании объекта.

Экспериментальный метод составления математического описания используется для управления и исследования объектов в узком, "рабочем" диапазоне изменения входных и выходных переменных (например, при построении системы автоматической стабилизации отдельных технологических параметров). Эти методы чаще всего основываются на предположении о линейности и сосредоточенности параметров объекта. Принятие этих допущений позволяет сравнительно просто описывать наблюдаемые процессы алгебраическими или линейными дифференциальными уравнениями с постоянными коэффициентами. При экспериментальном подходе к составлению математического описания всегда требуется постановка опытов непосредственно на изучаемом объекте.

Достоинством экспериментальных методов является простота получаемого математического описания при достаточно точном описании свойств объекта в узком диапазоне изменения параметров.

Основной недостаток экспериментальных методов — невозможность установления функциональной связи между входящими в уравнения числовыми параметрами и конструктивными характеристиками объекта, режимными параметрами процесса, физико-химическими свойствами веществ. Кроме того, полученные экспериментальным методом математические описания нельзя распространять на другие однотипные объекты.

Наличие "сильных" и "слабых" сторон аналитического и экспериментального методов составления математического описания привело к необходимости разработки комбинированного экспериментально-аналитического метода. Сущность его заключается в аналитическом составлении уравнений описания, проведении экспериментальных исследований и нахождении по их результатам параметров уравнений. При подобном подходе к получению математического описания сохраняются многие положительные свойства экспериментальных и аналитических методов [13].

1.6.4 Уравнение регрессии

Полином (уравнение регрессии) может содержать:

- линейные члены ($y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + \dots$);
- перекрестные квадратичные члены ($+b_{12}x_1x_2 + b_{13}x_1x_3 + \dots$);
- квадратичные члены ($+b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2 + \dots$);
- перекрестные кубические члены ($+b_{112}x_1^2x_2 + b_{113}x_1^2x_3 + \dots$);
- кубические члены ($+b_{111}x_1^3 + b_{222}x_2^3 + \dots$),

где x_i – независимые переменные, аргументы, факторы;

y – зависимая переменная, функция, отклик;

b_i – коэффициенты пропорциональности, параметры.

Пусть, например, для определенности, y является функцией двух переменных x_1 и x_2 . Тогда полное квадратичное уравнение регрессии запишется в виде:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2 + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2 \quad (1.6)$$

Главной особенностью уравнений регрессии является их линейность относительно коэффициентов b_i , что позволяет довольно просто их вычислить. Для этого уравнение (1.6) перепишем в виде:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_4x_4 + b_5x_5, \quad (1.7)$$

где $b_3 = b_{12}$;

$$b_4 = b_{11};$$

$$b_5 = b_{22};$$

$$x_3 = x_2x_1;$$

$$x_4 = x_1^2;$$

$$x_5 = x_2^2.$$

Вводя для симметрии фиктивный фактор $x_0 = 1$, получим:

$$y = b_0x_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + \dots + b_5x_5 \quad (1.8)$$

И, наконец, короче для $(n + 1)$ факторов:

$$y = \sum_{i=1}^n b_i x_i \quad (1.9)$$

Задача обработки экспериментальных исследований, как правило, заключается в том, чтобы по опытным данным наилучшим образом определить численные значения параметров b_i .

Из элементарной математики известно, что для нахождения $(n + 1)$ неизвестных величин b_i достаточно произвести $(n + 1)$ серии опытов с целью составить необходимое число уравнений вида (1.9) для определения неизвестных. Обычно же число опытов увеличивают и получают системы из m уравнений с $(n + 1)$ неизвестными.

Избыточные уравнения обеспечивают контроль и предохраняют от грубых ошибок, дают возможность получить более точные результаты и позволяют оценить ошибки, как отдельных измерений, так и окончательных выводов.

Система из m линейных уравнений вида (1.9) с $(n + 1)$ неизвестными, когда число уравнений m больше числа неизвестных $(n + 1)$, называется

системой условных уравнений и в общем случае несовместна, то есть не имеет однозначного решения [5].

Технологический объект представляется в виде «черного ящика», представленный на рисунке 1.16. Черный ящик – объект исследования, имеющий $(k + p)$ входов и m выходов.



Рисунок 1.16 – «Черный ящик»

Внешние связи системы можно представить схемой. Прямоугольник символизирует систему. Буквами h , x , z обозначены воздействия, оказываемые на систему. Будем называть их входами системы, или факторами. В некоторых случаях для краткости факторы h_1, h_2, \dots, h_m в их совокупности будем обозначать через H (вектор факторов h), факторы x_1, \dots, x_n – через X , факторы z_1, z_2, \dots – соответственно через Z . Обозначения y_1, \dots, y_k – относятся к воздействиям системы на окружающий мир, это – результаты функционирования системы; будем называть их выходами системы, или откликами (имеется в виду отклик системы на воздействие факторов). К их числу относятся количество произведенного продукта, его качественные показатели, себестоимость, прибыль предприятия, количество выбрасываемых в окружающую среду вредных примесей и множество других показателей.

Входы разделены на три группы: H , X , Z . Факторы H и X – контролируемые входы. Это те воздействия, которые мы контролируем (измеряем) в процессе функционирования системы.

При этом h_1, h_2, \dots, h_m – факторы, контролируемые, но нерегулируемые. Мы измеряем их, знаем их величины, но не изменяем их произвольно. Нерегулируемость части входов может быть связана с разными причинами. Прежде всего, некоторые факторы трудно регулировать: трудно изменить диаметр работающего аппарата (а диаметр – фактор, который может существенно влиять на ход процесса); трудно регулировать состав сырья (что завод получил, то и надо перерабатывать) и т. д. Иногда организовать регулирование технически нетрудно, но регулирование слишком большого числа факторов настолько усложняет систему управления процессом, что предпочитают оставлять нерегулируемыми те из факторов, которые влияют слабее прочих.

X – вектор контролируемых и регулируемых входов. Это те воздействия, которые мы изменяем, чтобы управлять системой. Поэтому обычно их называют управляющими факторами, или коротко управлениями.

Наконец, Z – вектор неконтролируемых факторов. Это те воздействия на систему, которые находятся вне нашего контроля.

Возможны три основных причины того, что тот или иной фактор оказывается неконтролируемым. Во-первых, объект может быть плохо изучен, вследствие чего мы не знаем, что данный фактор существенно влияет на поведение объекта, и поэтому не контролируем этот фактор.

Вторая причина неконтролируемости фактора – неумение его контролировать. Есть один важный фактор, сильно влияющий на самые разнообразные системы, контролировать который мы умеем очень плохо. Это индивидуальность и душевное состояние человека, работающего с данной системой. Мы далеко не всегда знаем, какие именно параметры этого сложного фактора оказывают влияние и как их измерять.

Сейчас проблеме взаимодействия человека с теми системами, которыми он управляет, уделяется очень большое внимание. Иногда получаемые результаты оказываются неожиданными.

Наиболее распространена третья причина, по которой мы не контролируем множество входных воздействий. Каждое воздействие из этого множества слишком слабо, чтобы стоило его контролировать. С другой стороны, таких слабых воздействий столь много (практически бесконечно много), что все их контролировать невозможно. На химико-технологический процесс как-то влияют и микропримеси, попадающие из воздуха и из аппаратуры, и солнечный луч, пробившийся в окно и слегка подогревший аппарат, и вибрации от проехавшего за стеной грузовика, чуть-чуть уплотнившие слой катализатора... стоит ли продолжать?

При этом каждый из этих факторов влияет очень слабо, но их столь много, что совокупное их влияние оказывается весьма ощутимым. Важно отметить, что это влияние носит случайный характер: не контролируя входы Z , невозможно предсказать, как они повлияют в той или иной момент. В эксперименте их влияние появляется в случайных ошибках опытов; на производстве – в случайных возмущениях режима. В целом влияние неконтролируемых воздействий часто обозначают термином шум. Учет шума необходим в большинстве технологических задач.

Математические описания функционирования системы в общем виде представляют собой систему уравнений вида:

$$y_i = \varphi_i(H, X, Z) \quad (1.10)$$

В принципе каждое из уравнений (1.10) определяет зависимость i -ого выхода от всех входных воздействий. Но установить вид функции φ принципиально невозможно: мы не знаем даже списка аргументов этой

функции – ведь факторы Z нам неизвестны. К счастью, во многих случаях каждое из уравнений (1.10) достаточно точно можно представить в виде

$$y_i = F_i(H, X) + \Psi_i(Z) \quad (1.11)$$

Здесь функция разбита на два слагаемых: зависимость F_i контролируемых факторов и шум Ψ_i теперь уже задача создания математической модели процесса приобретает смысл: нужно установить вид функции F и оценить шум ψ . Часто под математической моделью понимают именно совокупность функций $F_i(H, X)$, выделяя оценку шума в отдельную задачу. Мы тоже будем называть математической моделью (математическим описанием) систему уравнений

$$y_i = F_i(H, X) \quad (1.12)$$

Однако, в таком виде модель по существу неполна; в любом ответственном случае оценка шума обязательна.

Проводя опыты при эмпирическом подходе, мы не знаем, в каком виде следует получать функцию отклика. Если y зависит только от одного x , а вид зависимости достаточно прост, то можно судить об этом виде на глаз, по графику. Если аргументов несколько или если график сложен, то этот путь закрыт. Поэтому для нахождения вида функции (1.12) обычно пользуются тем, что большинство функций, с которыми приходится иметь дело на практике, можно разложить в ряд Тейлора (степенной ряд). Если ограничиться несколькими первыми членами ряда, получится представление функции многочленом (полиномом). Этот многочлен есть приближенное выражение неизвестной функции $F(H, X)$; качество приближения определяется величиной остатка ряда — той его части, которую мы отбрасываем. Чтобы наше приближение удовлетворительно описывало процесс, нужно, чтобы остаток был невелик по сравнению с шумом. Тогда дальнейшее уточнение функции теряет смысл: мы не можем выявить, действительно ли следующие члены отражают уточненную функцию или они связаны лишь со случайными ошибками опыта.

Обычно вначале рассчитывают более простые многочлены; отклонение опытных точек от расчетных значений сравнивают со случайной ошибкой эксперимента. Если обе величины – одного порядка, то описание считают удовлетворительным. Если отклонение нельзя объяснить случайной ошибкой, то рассчитывают более сложный многочлен.

Так, рассмотрим случай, когда y зависит от трех переменных x_1, x_2 и x_3 . Первое возможное предположение: y на самом деле не зависит от контролируемых входов, и все его отклонения от среднего значения y объясняются случайными ошибками

$$y = b_0 = \bar{y} \quad (1.13)$$

Здесь и далее b — эмпирический коэффициент.

Если проверка покажет, что отклонения y от значения y действительно имеют тот же порядок, что и случайная ошибка опытов, то в дальнейшем можно пользоваться формулой (1.13), т. е. считать y константой. Если различия между опытными и расчетными значениями y нельзя объяснить случайными ошибками, то уравнение (1.13) неадекватно и нужно проверить следующее приближение – линейное:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 \quad (1.14)$$

Проверка производится снова. Если неадекватно и выражение (1.14), то обрабатывают результаты в виде многочлена второго порядка:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2 + b_{33}x_3^2 + \\ + b_{12}x_1x_2 + b_{13}x_1x_3 + b_{23}x_2x_3 \quad (1.15)$$

При неадекватности этого уравнения можно проверить многочлен 3-го порядка, и т. д.

По мере роста порядка многочлена точность описания растёт, но одновременно все усложняется трактовка модели — анализ влияния каждого входа. Кроме того, чем больше коэффициентов содержит уравнение, тем больше опытов необходимо провести для их нахождения: минимальное число опытов равно числу коэффициентов, а для возможности оценки адекватности нужно провести больше опытов, чем будет коэффициентов. Значит, для получения линейной модели (9) опытов должно быть не менее 4, для модели (1.15) — не менее 10, а для модели 3-го порядка с тремя аргументами — уже как минимум 20. Уравнения порядка выше третьего (при более чем одном аргументе) на практике встречаются редко.

Представление эмпирических зависимостей многочленами встречается наиболее часто. Это связано с тем, что математические свойства таких приближенных формул хорошо изучены и с ними удобно обращаться. Правда, некритическое использование полиномиальных формул (формул в виде многочленов) не всегда приводит к успеху. Некоторые свойства объекта часто удобнее отражать при помощи формул, содержащих функции иных классов.

Так, при описании колебательных процессов несомненно удобнее использовать тригонометрические функции. Если пределы изменения невелики, такой процесс можно описать и многочленом, но он будет неоправданно сложным [6].

1.6.5 Методы исследования математической модели

Одним из важнейших первичных этапов математического моделирования является выбор концепции моделирования. Обычно математическая модель включает некоторые фундаментальные первичные законы, а также частные закономерности специфических для рассматриваемого объекта процессов. Не следует стремиться с самого начала работы к созданию адекватной модели рассматриваемого процесса, хотя эта цель должна, разумеется, существовать. Однако попытка сразу, с первого подхода, достигнуть высокой адекватности имеет шансы на реализацию только при наличии большого опыта математического моделирования именно в рассматриваемой области.

При моделировании в новой области можно рекомендовать следующий подход к решению задачи. На первом этапе следует создать «грубую», по терминологии академика А. А. Андропова, или даже «максимально грубую» модель. Речь идет об учете только небольшого числа самых существенных факторов. Разумеется, претендовать на высокую адекватность «грубой» модели не приходится. Однако работа с такой моделью разовьет интуицию исследователя и составит базу для создания следующей, более адекватной модели, в которую целесообразно включить дополнительный фактор по сравнению с теми, которые вошли в первую — самую «грубую» модель. Получив вторую модель, следует проверить, даст ли правильный результат предельный подход к первой модели. Этот переход можно осуществить, если, например, устремить к нулю какой-либо параметр, значение которого связано с дополнительным фактором, введенным во вторую модель. В результате предельного перехода будут получены уравнение «грубого» приближения и его решение. Такая проверка с помощью предельного перехода может быть проведена, как при численном решении задачи, так и при аналитическом [3].

Метод последовательного усложнения модели введением дополнительных факторов или процессов может продолжаться до достижения необходимой адекватности модели. Именно так поступают на практике, постепенно переходя от простого к более сложному. В качестве имитационной модели исследуемого процесса сначала рассматривается модель в виде линейного полинома (1-го порядка), как наиболее простой и грубой модели, составленной на основании, и осуществляется первоначальное планирование и проведение эксперимента. Только после анализа и оценки результатов эксперимента переходят к более сложной предполагаемой имитационной модели (2-го порядка), на основании которой вновь осуществляют планирование и проведение эксперимента. После чего вновь проводятся анализ и оценка результатов эксперимента. Этот процесс усложнения имитационной модели продолжается до достижения необходимой адекватности математической модели исследуемому процессу.

К преимуществам системы разработки математических моделей, основанной на принципе постепенного перехода от простого к более сложному, следует отнести:

- развитие интуиции в ходе моделирования;
- дополнительный способ проверки правильности результатов;
- выявление роли дополнительных факторов и их взаимодействий, которые последовательно вводятся в модель.

Эта система разработки математических моделей напоминает систему вложенных друг в друга матрешек.

1.6.6 Проверка адекватности модели

Адекватность модели реальному объекту оценивается по близости результатов расчетов по модели контрольным экспериментальным данным. Методы оценки адекватности можно разделить на субъективные и объективные, в последнем случае оценка адекватности выполняется независимо от мнения исследователя по специальным критериям.

Адекватность – соответствие полученной математической модели реальному процессу. Гипотеза об адекватности разработанной математической модели проверяется по статистическому критерию Фишера (F_p).

$$F_p = \frac{S_{ад}^2}{S_{воспр}^2}, \quad (1.16)$$

где $S_{ад}^2$ – дисперсия адекватности. Характеризует погрешность разрабатываемой мат. Модели относительно контрольных опытов. Очевидно, что чем меньше погрешность модели, тем выше ее адекватность.

$$S_{ад}^2 = \frac{m \cdot \sum_{i=1}^n (\bar{y}_i - \hat{y}_i)^2}{n - L}, \quad (1.17)$$

где \hat{y}_i – расчётный параметр оптимизации;

L – количество значимых коэффициентов b_i .

Полученный F_p сравнивают с $F_{табл}$. Если $F_p < F_{табл}$ – уравнение адекватно. В противном случае уравнение неадекватно и следует перейти к планам более высокого порядка.

Критерий Фишера находят по таблицам по степеням свободы числителя (f_4) и знаменателя (f_3).

$$f_4 = (n-L); \quad f_3 = n \cdot (m-1).$$

1.6.7 Оптимизация математической модели

В конечном счете целью моделирования химико-технологического процесса является его наилучшая реализация, его оптимизация. Современный этап развития химической технологии, как и вообще всех технических наук, характеризуется принципиально новой постановкой задачи оптимизации.

Разумеется, человек всегда старался организовать свою деятельность так, чтобы результаты ее были наилучшими. Но в прежние, причем совсем недавние, времена, еще два – три десятка лет назад, задачи оптимизации отдельных производств и отдельных этапов производства решались изолированно одна от другой. При этом в большинстве случаев при решении вопроса, какой вариант, какой режим является оптимальным, огромную, часто решающую роль играли опыт и интуиция исследователя, проектировщика, эксплуатационника.

Объяснялось это большой сложностью технологических процессов, чрезвычайным обилием и разнообразием взаимосвязей внутри каждого процесса. Для эффективного решения задачи оптимизации необходимо оценить влияние всех этих взаимосвязей и сравнить колоссальное число возможных вариантов организации технологии. Возможность такой оценки и такого сравнения на основе традиционных методов отсутствовала. Поэтому столь большая роль отводилась интуиции человека, и поэтому оптимизация процессов осуществлялась столь неэффективно.

Очень часто на стадии разработки выбирался далеко не лучший вариант, и после пуска производства начинались бесчисленные переделки: ошупью искали пути улучшения процесса. Нередко эти переделки растягивались на 10—15 лет.

К сожалению, такой метод оптимизации полностью еще не изжит. Но он стал уже анахронизмом. Развитие кибернетики — науки об управлении сложными системами, широкое распространение быстродействующей вычислительной техники привели к формированию оптимизации как целостного научного направления с едиными методами, применимыми к самым разнообразным областям техники. Разработка современного химико-технологического процесса включает оптимизацию как совершенно необходимый этап.

Для современного подхода к оптимизации характерна формализация задачи. Задача формулируется стандартным образом, после чего дальнейшее ее решение проводится на основе четкого однозначного рецепта — алгоритма.

Формализация, во-первых, позволяет единообразно решать задачи из самых различных областей. Во-вторых, формализованные задачи

приспособлены для решения на электронно-вычислительных машинах. Применение вычислительной техники обеспечивает возможность перебора большого числа вариантов и выбора из них наилучшего. Поэтому формализация приводит к резкому повышению эффективности процедуры решения задачи.

При формализации задачи оптимизации возникает важное диалектическое противоречие. Задача распадается на три основных этапа:

- формулирование задачи, приведение ее к одной из стандартных форм;
- нахождение оптимальных условий на основе алгоритма оптимизации;
- реализация оптимальных условий на практике.

Так вот, методы решения на первом и втором этапах взаимно противоположны: второй этап, как правило, целиком формализован на основе алгоритма решения, а первый этап неформален. Здесь не поможет никакая математика. Первый этап решения задачи связывает конкретные особенности объекта с общим методом решения.

Если задача оптимизации плохо сформулирована, то совершенно правильное ее решение даст результат, для практики абсурдный. Иногда именно хорошая формулировка задачи определяет успех оптимизации в целом. На этапе формулирования задачи приходится учитывать физико-химические особенности процесса, его экономичность, общее развитие промышленности, рыночную конъюнктуру и множество других обстоятельств.

Как правило, формулировка задачи оптимизации включает выбор критерия оптимальности, установление ограничений, выбор оптимизирующих факторов и запись целевой функции.

Критерий оптимальности – это главный признак, по которому судят о том, насколько хорошо функционирует данная система, работает данный процесс, насколько хорошо решена задача оптимизации.

О работе судят по ее результатам. Поэтому критерий оптимальности является одним из результатов, одним из выходов системы. Чтобы выбранный критерий оптимальности можно было эффективно использовать на следующем этапе, он должен удовлетворять трем основным требованиям.

Во-первых, критерий оптимальности должен быть единственным. Это самое тяжелое требование. Дело в том, что, как правило, нас интересует ряд выходов системы, и мы хотим, чтобы по всем им система была наилучшей.

Иногда говорят так: оптимальным является такое ведение технологического процесса, при котором производительность установки и качество продукта максимальны, а затраты и потери минимальны. При внешней привлекательности, такая постановка задачи утопична и потому объективно вредна. Так вести процесс невозможно.

Обычно наиболее обоснованы, наиболее хорошо работают экономические критерии — такие, как прибыль, норма прибыли, рентабельность, приведенный доход, себестоимость. Однако чаще всего характер зависимости этих критериев от входных параметров системы сложен. Для упрощения задачи зачастую пользуются технологическими критериями — например, производительностью, чистотой продукта, выходом продукта и т. д. Каждый технологический критерий в конечном счете связан с экономикой: чем больше производительность, тем выше будет прибыль; чем выше чистота, тем меньше будут затраты на следующих стадиях, и т. д.

При оптимизации производства в целом или его крупных подразделений естественно применять экономические критерии. Технологические критерии удобны при оптимизации более мелких объектов: отдельного узла, аппарата, небольшой цепочки аппаратов, т. е. при локальной оптимизации. При их применении следует особенно тщательно учитывать особенности процесса: критерий, пригодный в одних условиях, может совершенно не годиться в другом.

Второе требование: критерий оптимальности должен выражаться числом. В противном случае сопоставление разных вариантов становится крайне затруднительным.

Третье обязательное свойство критерия оптимальности: его величина должна изменяться монотонно при улучшении качества функционирования системы. Это значит, что оценивать объект можно по принципу: «чем больше критерий, тем лучше», либо «чем меньше критерий, тем лучше», но ни в коем случае не по принципу: «вот это значение критерия оптимально, а отклоняться от него не следует».

В приведенных формулировках безразличны оценки «больше» или «меньше». Они определяются физическим смыслом критерия. Хорошо, когда прибыль велика, но когда себестоимость мала; когда велика производительность, но малы потери. Умножив любой критерий на -1 , мы превратим «больше» в «меньше», и наоборот.

Но вот критерий, обладающий некоторым оптимальным значением, от которого нежелательно отклоняться, не годится. Например, в лекарственной смеси содержание того или иного ингредиента не может являться критерием оптимальности: иначе мы бы получили не смесь заданного состава, а максимальную концентрацию одного вещества.

Если для какого-то параметра, характеризующего систему, существует оптимальное значение, то этот параметр — не критерий оптимальности, а оптимизирующий фактор.

Как бы хорошо ни был выбран критерий оптимальности, этого в большинстве задач недостаточно, чтобы учесть все условия, в которых

должен проходить процесс. С одной стороны, нас всегда интересует не один результат процесса, а многие. С другой — никогда не удастся реализовать все значения входных параметров, которые желательны. Условия, которые необходимо соблюдать независимо от того, как их соблюдение повлияет на величину критерия оптимальности называют ограничениями.

Чаще всего ограничения возникают по следующим причинам:

- по количеству и качеству сырья и продукции: состав сырья, как правило, задается не нами, и менять его нельзя: количество сырья также может быть ограничено; выпуск продукции не должен быть меньше планового и больше того, что можно реализовать; качество продукта не должно быть ниже требований ГОСТа;

- по условиям технологии: расход воздуха не может превышать производительность вентилятора; температура не может быть выше предела, при котором портится материал аппарата или катализатор; размеры аппаратов изменять мы не можем, и т. д.;

- по экономическим и конъюнктурным соображениям: капитальные затраты не должны превышать выделенной суммы; срок ввода нового производства не должен быть позже запланированного; нельзя применять методы и устройства, защищенные иностранными патентами;

- по соображениям охраны труда и окружающей среды: чрезвычайно важная группа ограничений, жесткость, которых все возрастает.

Кроме этой классификации, ограничения можно различать по формально-математическим признакам. Так, выделяют ограничения типа равенств и типа неравенств.

Ограничения типа равенств устанавливают определенное значение того или иного фактора

$$h_i = a_i \tag{1.18}$$

Чаще всего фактор h_i можно рассматривать как один из контролируемых нерегулируемых входов. Так, в конкретных условиях работы задаются численные значения, характеризующие состав сырья, размеры аппаратов, нагрузку на аппарат и т. д.

Ограничения типа неравенств определяют пределы, в которых допустимо изменение параметров f процесса

$$\begin{cases} f_j \geq a_j \\ f_k \leq b_k \\ a_i \geq f \geq b_i \end{cases} \tag{1.19}$$

Для первых ограничения (1.19) задают односторонние пределы (например, производительность не ниже заданной; температура не выше той, на которую рассчитан материал). Третье — двусторонние (например, температура в пределах от температуры замерзания до температуры кипения).

Наконец, в математических процедурах нахождения оптимума играет роль деление ограничений по следующему признаку: ограничения 1-го рода условия (1.18) или (1.19), где в качестве параметров h и f фигурируют входные факторы; в ограничениях 2-го рода эти параметры — различные функции входов, например, выходные показатели или, скажем, температуры в каких-то точках внутри аппарата. Когда при математическом решении задачи рассматривается какой-либо режим, то он задается значениями входов. При этом вопрос о том, не нарушены ли какие-либо ограничения 1-го рода, проверяется непосредственно. А для проверки соблюдения ограничений 2-го рода необходимо сначала рассчитать соответствующие параметры-функции, что может осложнить расчет.

Оптимизирующие факторы — те из входов системы, которые в процессе оптимизации относят к управляющим. Это те воздействия, которые мы применяем для оптимизации процесса. Остальные факторы при этом не регулируются, хотя их значения, разумеется, учитывают при определении оптимальных условий: эти факторы фигурируют в задаче в качестве ограничений типа равенств.

Число оптимизирующих факторов зависит от того, на какой стадии разработки производства осуществляется оптимизация. Если производство еще проектируется (оптимальное проектирование), то к числу оптимизирующих целесообразно отнести как можно большее число факторов. Действительно, на этой стадии регулировать факторы проще всего: регулирование (изменение значений) осуществляется не в действительности, а на математической модели. Поэтому здесь желательно найти оптимальные значения максимального числа факторов.

Но задача оптимизации возникает и после пуска производства (оптимальное управление). При этом число оптимизирующих воздействий становится существенно меньшим. Часть факторов мы уже не можем менять: таковы, например, размеры аппаратов. Но и не все остальные факторы целесообразно теперь регулировать. Дело в том, что чем больше управляющих факторов, тем сложнее система управления, сложнее ее математическая модель [6].

Целевая функция — это то же самое, что критерий оптимальности, но это критерий, рассматриваемый как функция входных факторов

$$F = F(x_1, x_2, \dots, x_n, h_1, \dots, h_m) \quad (1.20)$$

Чем больше (или чем меньше) значение F , тем лучше. Поэтому можно дать такое определение оптимума: оптимум – это экстремум (либо максимум, либо минимум) целевой функции.

Те значения факторов x_i , при которых достигается оптимум, называют оптимальными значениями. Таким образом, математически задача оптимизации формулируется как задача отыскания экстремума.

При этом в точке экстремума должны соблюдаться все ограничения. Поэтому во многих случаях оптимум приходится искать на краю области допустимых значений, за пределы которой нельзя выйти вследствие наличия ограничений.

1.6.8 Методы поиска оптимума

Методы отыскания точки оптимума можно разделить на три основных группы.

Аналитические методы. Их применяют, когда мы можем продифференцировать целевую функцию и искать экстремум, исходя из условия равенства нулю производных.

Численные, или поисковые методы. Для их применения нужно, чтобы целевая функция была вычислимой: должен быть известен алгоритм, по которому можно рассчитать значение критерия оптимальности при заданных значениях факторов.

Методы, применяемые, если целевая функция невычислима. Практически это значит, что вид функции неизвестен. Тогда остается одно: планировать и реализовать эксперимент так, чтобы в результате достичь района оптимума. Это — экспериментальная оптимизация, составляющая важный раздел планирования эксперимента.

Особая группа задач оптимизации — задачи, в которых критерий оптимальности представляет собой не функцию, а функционал. Так бывает, если критерий зависит не от значений каких-то факторов, а от характера непрерывного изменения этих факторов: например, если протекание переходного процесса определяется непрерывным изменением управляющего воздействия во времени, или если состав смеси на выходе из аппарата идеального вытеснения определяется профилем температуры по всей его длине. В таких задачах используют вариационные методы (вариационное исчисление, динамическое программирование, принцип максимума) [12].

1.6.9 Решение задач линейного программирования

Задачей линейного программирования является нахождение оптимума линейной целевой функции F конечного числа переменных x_i

$$F = c_1x_1 + c_2x_2 + \dots + c_nx_n \quad (1.21)$$

при условии, что переменные удовлетворяют конечному числу линейных ограничений вида:

$$a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \dots + a_{in}x_n \geq b_i, \quad (1.22)$$

$$a_{j1}x_1 + a_{j2}x_2 + \dots + a_{jn}x_n \leq b_j, \quad (1.23)$$

$$x_1 + x_2 + \dots + x_n \geq 0 \quad (1.24)$$

Задачу линейного программирования можно решать графическим или аналитическим методом.

Графический метод отличается простотой, наглядностью и позволяет всегда получить решение задачи. Единственным (к сожалению, крупнейшим) недостатком графического метода является его ограниченность в числе факторов: возможность графически представить на плоскости задачу с числом переменных $n=2$.

При решении задачи линейного программирования графическим методом необходимо перемещать прямую целевой функции F параллельно самой себе по области допустимых решений в направлении ее максимизации (или минимизации) и зафиксировать ту вершину многоугольника, которую прямая целевой функции пройдет последней, покидая область допустимых решений.

Аналитический метод представляет собой некоторый алгоритм вычислений, выполняемых на компьютере. В настоящее время чаще всего пользуются алгоритмом, который называется симплекс-методом. Единственный и к сожалению, крупнейший недостаток аналитических методов за-

практике приводит к тому, что не всегда удается получить решение (так как диагностика неудачи практически невозможна).

Общий алгоритм аналитического решения любой задачи линейного программирования заключается в следующем:

Найти вершины выпуклого многоугольника (симплекса), как точки пересечения ограничений.

Вычислить значения целевой функции в каждой из вершин.

Сравнить вычисленные значения с целью определения оптимального значения (максимума или минимума).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Объектом работы была установка изомеризации ОАО «Ачинский НПЗ ВНК».

Проведена оптимизация процесса данной установки с последующим получением высококачественного компонента моторного топлива без конструктивных изменений.

Выбран объект оптимизации и обоснована необходимость его оптимизации; выбран критерий оптимальности в соответствии со всеми требованиями, предъявляемыми к нему; составлена математическая модель процесса, которая прошла проверку на адекватность; определены оптимальные параметры работы колонны, при которых достигается повышение октанового числа на 8 пунктов:

- X-factor – 12,722;
- расход фракции C5+ – 58,040 м³/ч;
- расход б/п К-104 – 3,65 м³/ч;
- расход б/п К-202 – 6,27 м³/ч.

Был получен оптимальный технологический режим, позволяющий работать установке в привычном для нее режиме, но с максимальной эффективностью:

- X-factor – 0,413;
- расход фракции C5+ – 60,024 м³/ч;
- расход б/п К-104 – 0,899 м³/ч;
- расход б/п К-202 – 0 м³/ч.

Эти данные можно непосредственно использовать на данной установке в структуре ОАО «АНПЗ ВНК».

СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ

БЗ – бензол;
ГФУ – газофракционирующая установка;
ДИГ – колонна деизогексанизации;
ДИП – колонна деизопентанизации;
ДМБ – диметилбутан;
МНК – метод наименьших квадратов;
МП – метилпентан;
МЦП – метилциклопентан;
ОЧИМ – октановое число по исследовательскому методу;
ОЧММ – октановое число по моторному методу;
ЦГ – циклогексан;
ЦП – циклопентан.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- 1 Справочник нефтехимика: научный сборник / под ред. С. К. Огородникова. - Ленинград, Химия, 1978. -496 с.
- 2 Бекиров, Т. М. Промысловая и заводская обработка природных и нефтяных газов: учебное пособие / Т.М. Бекиров. - Москва: Недра, 1980. - 293 с.
- 3 Закгейм, А. Ю. Введение в моделирование химико-технологических процессов: учебник / А. Ю. Закгейм. – Москва: Химия, 1982. – 288 с.
- 4 Альбом технологических схем процессов переработки нефти и газа: научный сборник/под ред. В. И. Бондаренко. - Москва: Химия, 1983. - 128 с.
- 5 Справочник нефтепереработчика: научный справочник/ под ред. Г. А. Ластовкина. - Ленинград, Химия, 1986. - 648 с.
- 6 Кафаров, В. В. Математическое моделирование основных процессов химических производств: учеб. пособие для вузов / Кафаров В. В., Глебов М. Б. – Москва: Высшая школа, 1991. – 400 с.
- 7 Современный эксперимент: подготовка, проведение, анализ результатов: учебник для высших учебных заведений / В. Г. Блохин [и др.]. – Москва: Радио и связь, 1997. – 232 с.
- 8 Каминский, Э.Ф. Глубокая переработка нефти. Технологические и экологические аспекты: учеб. пособие для вузов / Э.Ф. Каминский, В.А. Хавкин. - Москва: Техника, 2001. - 384 с.
- 9 Ахметов, С.А. Технология глубокой переработки нефти и газа: учебное пособие /С.А. Ахметов. - Москва: Химия, 2002. - 672 с.
- 10 Моделирование в химии: учебное пособие / В. М. Виноградов [и др.]. – Москва: Нефть и газ, 2003. – 161 с.
- 11 Буй, Ч. Х. Получение высокооктановых автомобильных бензинов с пониженным содержанием ароматических углеводородов: автореф. дис. ... канд. технич. наук / Буй Чонг Хан. – Уфа, 2008. – 24 с.
- 12 Чеканцев, Н. В. Оптимизация реакторного оборудования и условий промышленной эксплуатации процесса изомеризации пентан-гексановой фракции: дис. ... канд. технич. наук / Никита Витальевич Чеканцев. – Томск, 2009. – 67 с.
- 13 Технологический регламент ОАО «АНПЗ ВНК» установки изомеризации с предварительной гидроочисткой.