

УДК 66.01.001.57

ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОЦЕССОВ КАК ПУТЬ УВЕЛИЧЕНИЯ ИХ ЭФФЕКТИВНОСТИ**А.И. Бабаев**

Институт нефтехимических процессов им. Ю.Г. Мамадалиева Национальной АН Азербайджана
e-mail: abid_tahirov@mail.ru

В работе излагается постановка задач оптимизации и методы их решения на основе математического моделирования химико-технологического процесса с условием удовлетворения трем основным критериям: эффективности процесса, качества получаемой продукции и охраны окружающей среды. Приводится выражение критерия избирательности, который в зависимости от характера технологического процесса может быть различным. В качестве примеров рассмотрены два процесса - двухстадийный каталитический процесс получения уксусной кислоты и этилацетата и процесс пиролиза этана с обратной связью. В обоих случаях проведена их теоретическая оптимизация на основе разработанных математических моделей, в результате которой определяются пути увеличения избирательности процессов.

Ключевые слова: моделирование, оптимизация, химико-технологический процесс, каталитический процесс.

Проблемой большой практической важности является разработка единого методического подхода к задачам анализа и оптимизации разрабатываемых химических производств и технологий на стадии их планирования, так как именно на этой стадии определяются основные цели и условия их функционирования.

В связи с этим в работе рассматривается постановка задачи оптимизации и предлагаются методы ее решения на основе математического моделирования отдельно взятого химико-технологического процесса с целью нахождения тех параметров управления процессом, которые обеспечивают его стабильное оптимальное функционирование.

Надо отметить, что показатели качества продукции играют важную роль в химико - технологических процессах. Для целого ряда производств содержание примеси в составе целевого продукта не может быть выше допустимых норм; в противном случае часть продукта, не отвечающая показателям качества, бракуется и поступает на вторичную переработку или в отходы производства (например, при полимеризации этилена допустимое количество ацетилена должно быть меньше 5 ppm).

Таким образом, задача повышения качества целевого продукта может трактоваться как задача минимизации или максимизации содержания некоторых его компонентов.

Другая сторона проблемы – охрана окружающей среды – это вопрос эффективности химико-технологического процесса, критерий которой - избирательность процесса - предлагается вычислять следующим образом:

$$I = \frac{S_1}{S_1 + S_2 + S_3},$$

где S_1 - сумма целевых продуктов; S_2 - сумма побочных продуктов, полученных из сырья; S_3 - количество веществ, выбрасываемых в атмосферу. В зависимости от характера технологического процесса S_2 или S_3 могут быть равны нулю. Если они одновременно равны нулю, то данный процесс можно считать безотходным, и избирательность процесса будет 100%-ной.

Чтобы удовлетворить эти потребности, необходимо вложение значительных средств в теоретические и экспериментальные исследования для создания новых катализаторов с усовершенствованным компьютерным моделированием каталитических процессов.

Исследования в области катализа необходимо дополнять вопросами контроля над стабильностью и сроком службы катализаторов. Кроме того, важным моментом, связанным с определенными областями применения, должна стать реализация системных подходов к катализу, например, проектирование новых реакторов, минимизация отходов, сокращение энергопотребления, создание эффективных методов избирательной доставки реагента и выделения продуктов.

В качестве конкретного примера нами рассмотрен двухстадийный катали-

тический процесс получения уксусной кислоты и этилацетата [1]. В первой стадии процесса из этанола образуются целевой продукт - уксусная кислота, происходит образование ацетальдегида и двуокиси углерода. Ацетальдегид рециркулируется в систему, а двуокись углерода выбрасывается в атмосферу. В этом случае избирательность определяется следующим образом:

$$I = \frac{S_1}{S_1 + S_3}$$

На втором этапе из этанола и уксусной кислоты получается целевой продукт — этилацетат. Математическая модель для первой стадии имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{dA_1}{dl} &= S \cdot \frac{k_3 b_1 b_3 P_1 P_4}{\left(1 + b_1 P_1 + b_2 \sqrt{P_2} + b_3 P_4 + b_4 P_5\right)^2} \\ \frac{dA_2}{dl} &= S \left(\frac{k_2 b_4 b_2 P_5 \sqrt{P_2}}{\left(1 + b_1 P_1 + b_2 \sqrt{P_2} + b_3 P_4 + b_4 P_5\right)^2} - \frac{k_3 b_1 b_3 P_1 P_4}{\left(1 + b_1 P_1 + b_2 \sqrt{P_2} + b_3 P_4 + b_4 P_5\right)^2} \right) \\ \frac{dA_3}{dl} &= S \left(\frac{k_1 b_1 b_2 P_1 \sqrt{P_2} - k_2 b_2 b_4 P_5 \sqrt{P_2}}{\left(1 + b_1 P_1 + b_2 \sqrt{P_2} + b_3 P_4 + b_4 P_5\right)^2} - \frac{k_4 b_4 P_5 \sqrt{P_2}}{1 + b_1 P_1 + b_2 \sqrt{P_2} + b_3 P_4 + b_4 P_5} \right) \\ \frac{dA_4}{dl} &= \frac{2k_4 b_4 P_5 P_2}{1 + b_1 P_1 + b_2 \sqrt{P_2} + b_3 P_4 + b_4 P_5} \\ \frac{dT}{dl} &= - \frac{\sum_{i=1}^4 r_i \Delta H_i}{\sum_{i=1}^8 n_i C_{pi}} - \frac{\alpha(T - T_x)}{\sum_{i=1}^8 n_i C_{pi}} \end{aligned}$$

Результаты теоретической оптимизации по разработанной математической модели приведены в таблице 1.

Как видно из таблицы, с увеличением оптимальных значений конверсии этанола при разных соотношениях этанола

к кислороду увеличивается выход побочного продукта CO_2 , который выбрасывается в атмосферу, что приводит к увеличению себестоимости уксусной кислоты, а это влияет на себестоимость первой и второй стадий процесса в целом.

Таблица 1. Результаты теоретической оптимизации.

I	0.7958	0.7710	0.7610	0.7566	0.7520	0.7522
$G_{y.k.}, \text{кг/час}$	2612	2649	2785	2785	3255	4914
$X_k, \%$	20	21	22	22	27	40
$\text{CO}_2, \text{кг/час}$	675	788	874	896	1074	1619
Ацетальдегид (рециркулирующий)	1177	2292	3296	3654	3872	3423

За счет применения разработанного нового катализатора на второй стадии процесса побочные продукты и выбросы не образуются, т.е. катализатор работает со 100%-ой селективностью.

Рассмотрим процесс пиролиза этана с обратной связью [2]. Процесс пиролиза этана сопровождается параллельно протекающими побочными превращениями, приводящими к уменьшению выхода целевого продукта этилена. Максимальному выходу этилена будет соответствовать определенная глубина превращения при однократной переработке исходного сырья. Дальнейшее углубление процесса за один проход может привести

лишь к увеличению выхода побочных продуктов. Поэтому весьма важным для наиболее благоприятного ведения процесса является нахождение той глубины превращения и той доли рециркулята, при которых достигался бы наибольший выход целевого продукта.

Для исследования указанных вопросов, прежде всего, необходимо составить математическое описание процесса, отражающее особенности применения рециркуляции.

Разработанная соответственно предложенной стехиометрической схеме кинетическая модель процесса представлена следующими уравнениями.

$$\begin{aligned}\frac{dn_1}{dl} &= -u^{-1} \left[k_1 n_1 + k_7 n_1 \cdot \frac{n_2 P}{\sum n_i RT} - \frac{k_1}{k_{p1}} \cdot n_2 \frac{n_3 P}{\sum n_i RT} \right] \\ \frac{dn_2}{dl} &= -u^{-1} n_2 \left[k_1 \frac{n_1}{n_2} - \frac{k_1}{k_{p1}} \cdot \frac{n_3 P}{\sum n_i RT} - k_2 \left(\frac{n_3 P}{\sum n_i RT} \right)^2 + \frac{k_2}{k_{p2}} \cdot \frac{n^2 P}{n_1 \sum n_i RT} - k_3 - k_4 - \right. \\ &\quad \left. - k_5 - k_6 - k_7 \frac{n_1 P}{\sum n_i RT} \right] \\ \frac{dn_3}{dl} &= u^{-1} \left[k_1 n_1 + \frac{k_2 n_2^2 P}{k_{p2} RT \sum n_i} + n_2 \left(-\frac{k_1 n_3 P}{k_{p1} RT \sum n_i} - 2k_2 \left(\frac{n_3 P}{RT \sum n_i} \right)^2 + \frac{1}{8} k_3 + k_4 + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + k_5 + 2k_6 + \frac{93}{150} k_7 \frac{n_1 P}{RT \sum n_i} \right) + \frac{n_{15} P}{RT \sum n_i} (k_8 n_{10} + k_9 n_{13}) \right] \\ \frac{dn_4}{dl} &= 2k_2 u^{-1} \left[n_2 \left(\frac{n_3 P}{\sum n_i RT} \right)^2 - \frac{1}{k_{p2}} \left(\frac{n_4 P}{RT \sum n_i} \right)^2 \right]; \\ \frac{dn_5}{dl} &= u^{-1} k_3 \frac{n_2}{4}; \\ \frac{dn_6}{dl} &= u^{-1} k_3 \frac{n_2}{8}; \quad \frac{dn_7}{dl} = u^{-1} k_3 \frac{n_2}{8}; \quad \frac{dn_8}{dl} = u^{-1} k_4 \frac{n_2}{3}; \quad \frac{dn_9}{dl} = u^{-1} k_5 n_2; \\ \frac{dn_{10}}{dl} &= u^{-1} \left[2k_6 n_2 - k_8 n_{10} \frac{n_{15} P}{RT \sum n_i} \right]; \quad \frac{dn_{11}}{dl} = \frac{143}{150} u^{-1} k_7 n_2 \frac{n_1 P}{RT \sum n_i};\end{aligned}$$

$$\frac{dn_{12}}{dl} = \frac{57}{150} u^{-1} k_7 n_2 \frac{n_1 P}{RT \sum n_i}; \frac{dn_{13}}{dl} = u^{-1} k_8 n_{10} \frac{n_{15} P}{RT \sum n_i} - k_9 n_{13}; \frac{dn_{14}}{dl} = u^{-1} k_9 n_{13} \frac{n_{15} P}{RT \sum n_i},$$

где k_i - константы скоростей реакций; k_{p1} , k_{p2} - константы равновесия; n_i - соответственно число молей этана, этилена, водорода, метана, дивинила, бутилена, бутана, бензола, ацетилен, углерода, пропилена, пропана, окиси углерода, двуокиси углерода и воды; u - линейная скорость сырья; l - длина реактора; R - газовая постоянная.

На основе экспериментальных данных установки ЭП-300 Сумгаитского завода «Этилен-Полиэтилен» нами определены кинетические параметры предложенной модели.

В данном процессе целевыми продуктами являются этилен+пропилен; побочными - водород, метан, дивинил, бутилены, бутан, бензол, ацетилен, выбросами являются углерод, окись углерода и двуокись углерода.

В таблице 2 представлены результаты оптимизации безрециркуляционного процесса пиролиза этана в следующих интервалах изменения заводских входных параметров: $g_{\text{этан}}=2\div5$ т/час; $t_0=775\div850^\circ\text{C}$; отношение водяной пар:сырье – 1:1; 1.5:1 и 2:1; $P_0=3\div4.2$ атм - в зависимости от содержания водяного пара. В результате оптимизации было определено, что в начале процесса преобладают первичные реакции, поэтому на первом от начала реакторе участке трубы скорость накопления этилена будет максимальной, а затем, по мере расходования этана, она постепенно снижается, доходя до минусовых значений, при которых скорость расходования этилена на вторичные и третичные реакции начинает превышать скорость его накопления. Поэтому до этой точки (точка равновесия скоростей накопления и расходования этилена) количество C_2H_4 по длине реактора растет до максимального

значения 826.4 кг/час. Дальнейшее увеличение скорости расходования этилена на вторичные и третичные реакции приводит к снижению количества этилена до 692.1 кг/ч. Однако за счет обратимости реакции, по которой из метана частично образуется этилен, скорость расходования этилена уменьшается, но не настолько, чтобы привести к увеличению абсолютного выхода этилена. Поэтому на выходе из реактора количество этилена оказывается ниже, чем на предыдущих участках, причем максимальные значения этилена с увеличением загрузки для всех температур достигаются ближе к концу реактора. Поэтому получается, что, начиная с загрузки $g_{\text{этан}}=3.25$ т/ч, выходы целевых продуктов оказываются максимальными в конце реактора. Таким образом, с увеличением загрузки для каждой температуры селективность процесса возрастает, а с увеличением температуры - падает. Так как селективность процесса пиролиза углеводородного сырья определяется как отношение образовавшихся этилена+пропилена к количеству превращенного сырья, а этилен и пропилен образуются в результате первичных реакций, то повышению селективности будет способствовать подавление вторичных реакций разложения целевых продуктов. Для этого требуется уменьшить время пребывания сырья в зоне реакции и понизить парциальное давление углеводородов. Важным фактором, определяющим парциальное давление углеводородов, является разбавление углеводородного сырья водяным паром. Отсюда становится ясной необходимость решения вопроса об оптимальной для каждой загрузки степени разбавления сырья водяным паром.

ЛИТЕРАТУРА

1. Сафаров А.Р. Моделирование и оптимизация процессов получения уксусной кислоты и этилацетата по комбинированной технологии. Автореферат дисс. к.т.н. Баку. 2006. 26 с.
2. Бабаев А.И., Алиев А.М., Таиров А.З. и др. Моделирование и оптимизация процесса пиролиза этана с обратной связью. // Азерб. хим. журнал. 2008. №3. С.1629.

OPTİMALLAŞDIRMA PROSESLƏRİN EFFEKTİVLİYİNİ ARTIRILMASI YOLU KİMİ**Ə.İ.Babayev**

Məqalə kimya-texnologiya proseslərin riyazi model əsasında üç əsas kriteriya: effektivlik, keyfiyyət və ətraf mühitin qorunması şərtləri daxilində optimallaşdırılması məsələsinin həllinə həsr edilmişdir.

Etil spirtindən katalitik yolla sirkə turşusunun, etilasetatın alınması iki mərhələli prosesinin və etanın pirolizi prosesinin optimallaşdırılması məsələləri həll edilmişdir. Hər iki halda nəzəri optimallaşdırılma məsələsi proseslərin riyazi modelləri əsasında aparılmış və nəticədə proseslərin çıxımlarının artırılması qaydaları müəyyən edilmişdir.

Açar sözlər: *modelləşdirmə, optimallaşdırma, kimya-texnologiya prosesləri, katalitik proses.*

OPTIMIZATION OF PROCESSES AS METHOD OF RAISING THEIR EFFECTIVENESS**A.I.Babayev**

The work sets forth tasks of optimization and methods of their solution on the basis of mathematical modeling of chemical-technological process to comply with three main criteria: effectiveness of the process; quality of product obtained and environmental protection. The point is about the selectiveness criterion which, dependent on the nature of technological process may be different. Cited as an example, there have been observed two processes – 2-staged catalytic process of obtaining the acetic acid and ethyl-acetate, and the process of ethane pyrolysis with feedback. In both cases, their theoretical optimization has been carried out on the basis of mathematical models, following which methods of raising process selectiveness are determined.

Keywords: *modeling, optimization, chemical-technological process, catalytic process.*

Поступила в редакцию 25.10.2011