

Введение Процесс высокотемпературной изомеризации н-пентана широко распространен в нефтеперерабатывающей и нефтехимической промышленности ввиду дефицита изопентана для производства высокооктановых бензинов и изопрена, который используется для синтеза синтетических каучуков. Производство изомеризации н-пентана представляет собой систему взаимосвязанных аппаратов с материальными и тепловыми рециклами, обеспечивающими рекуперацию сырья и тепла. Высокие стоимости сырья, энергоресурсов и катализатора в производстве изопентана требуют поиска технологических конструкций и их режимов, обеспечивающих минимальные материальные затраты. Из-за сложности явлений, протекающих в аппаратах, многообразия связей между аппаратами решение задачи является достаточно трудоемким. Разработка эффективных методов решения задачи в приложении к крупнотоннажному промышленному процессу изомеризации н-пентана представляет актуальную прикладную проблему. Предложенные нами подходы были успешно опробованы на задачах проектирования разных ХТС [1, 2]. В данной работе с помощью разработанных нами подходов и алгоритмов решения задачи двухэтапного оптимального проектирования ХТС [3, 4] будет решена задача оптимального проектирования подсистемы реакторного узла, который входит в ХТС изомеризации н-пентана [5], с учетом имеющейся внутренней и внешней неопределенности в исходной информации. Для решения задачи будет использован разработанный нами программный комплекс решения задачи двухэтапной оптимизации с вероятностными ограничениями, которая имеет вид [6]: (1) $\min_{\mathbf{p}} F(\mathbf{p}, \mathbf{u}, \mathbf{v})$, (2) $\mathbf{p} \in \mathbf{P}$, (3) $\mathbf{u} \in \mathbf{U}$ где \mathbf{p} – вектор конструктивных параметров размерности n , F – вектор-функция с компонентами F_1, \dots, F_m , \mathbf{u} – вектор неопределенных параметров размерности k , \mathbf{v} – критерий эффективности функционирования ХТС, \mathbf{P} – область неопределенности, т.е. область изменения значений неопределенных параметров, \mathbf{U} – проектные ограничения, m – количество проектных ограничений. Ограничения (2) – вероятностные ограничения, которые выполняются с некоторой заданной вероятностью α , (3) – жесткие ограничения, которые выполняются безусловно на всей области неопределенности \mathbf{U} . Задача (1) является задачей полубесконечного программирования [7, 8]. Нами были рассмотрены подходы и методы, позволяющие решать такие задачи [9]. Для решения задачи (1) мы использовали модифицированный метод внешней аппроксимации [8]. Также нами были рассмотрены разные виды аппроксимации функций зависимостей управляющих параметров от неопределенных [1].

Описание технологической схемы Технологическая схема узла изомеризации н-пентана представлена на рисунке 1. Н-пентановая фракция смешивается с водородосодержащим газом (ВСГ) в смесителе, нагревается в рекуператоре до температуры за счет теплоты реакционных газов. Затем газосырьевая смесь (ГСС) нагревается в печи до температуры $T_{\text{реак}}$. Процесс изомеризации н-пентана протекает в реакторе в неподвижном слое алюмоплатинового катализатора ИП-

62 ВК в среде ВСГ при общем давлении. Контактный газ (КГ) из реактора охлаждается в рекуператоре и далее поступает на отделение от ВСГ и разделение продуктов реакции. Циркулирующий ВСГ частично стравливается для обеспечения требуемого парциального давления водорода. Далее к ВСГ добавляется свежий электролитический водород и после осушки ВСГ поступает на изомеризацию. Рис. 1 – Технологическая схема реакторного узла процесса изомеризации н-пентана

Состав н-пентановой фракции и ВСГ, поступающих на переработку в реакторный узел, приведены в табл. 1. Содержание водорода в ВСГ колеблется, диапазон изменения концентрации водорода в ВСГ приведен в таблице 2. Таблица 1 – Состав н-пентановой фракции и ВСГ

	Водород	Азот	Метан	Этан	Сырье, % вес
ВСГ, % вес	93,8	0,3	4,3	0,44	
Пропан					
Изопентан					
Н-Пентан					
Гексан					
Сырье, % вес	0	3,19	95,96	0,85	
ВСГ, % вес	0,17	0,7	0,29	0	

Для решения задачи проектирования оптимальной подсистемы реакторного узла процесса изомеризации н-пентана необходимо построить математическую модель подсистемы, которая включает математические модели отдельных аппаратов, входящих в подсистему. Математическая модель реактора

Реакция высокотемпературной изомеризации н-пентана на алюмоплатиновом катализаторе ИП-62 ВК [11] протекает через стадии дегидрирования н-пентана в олефин, изомеризации олефина в изоолефин, гидрирования изоолефина в изопентан. Учитывая, что лимитирующей стадией реакции является изомеризация олефина [12] и что, кроме основной реакции, процесс сопровождается необратимым гидрокрекингом н-пентана и изопентана в легкие углеводороды (метан-бутановая фракция), упрощенный механизм реакции может быть представлен в виде (4), где n , i обозначают н-пентан, изопентан, легкие углеводороды соответственно; k_1, k_2, k_3 – скорости реакций; ν_1, ν_2, ν_3 – стехиометрические коэффициенты. Реакции крекинга играют незначительную роль вследствие того, что реакция изомеризации протекает с малым тепловым эффектом и высокой селективностью. Этим обуславливается низкий суммарный тепловой эффект процесса, составляющий сырья. Скорости реакций изомеризации и побочных реакций описываются уравнениями [12] (5), где p_n, p_i, p_H – парциальные давления н-пентана, изопентана и водорода соответственно; k_1, k_2, k_3 – кажущиеся константы скоростей реакций, зависимость которых от температуры выражается уравнением Аррениуса (6) в котором A – газовая постоянная; T_0 – абсолютная температура; E – энергии активации; ν_1, ν_2, ν_3 – величины, и равны [5]: $\nu_1 = 1, \nu_2 = 1, \nu_3 = 1$. Значения величин k_1, k_2, k_3 вычислены в работе [5], на основе идентификации модели промышленного реактора и включают в себя погрешности измерения, ошибку идентификации и не учитывает изменение активности катализатора со временем. Поэтому будем считать эти значения неточными. Диапазоны изменения этих неопределенных параметров приведены в табл. 2. Таблица 2 – Диапазоны изменения неопределенных параметров

Параметр	1,9206·10 ¹³	1,98·10 ¹³	2,0394·10 ¹³	1,5132·10 ¹⁷	1,56·10 ¹⁷	1,6068·10 ¹⁷	4,5493·10 ¹⁷	4,69·10 ¹⁷
----------	-------------------------	-----------------------	-------------------------	-------------------------	-----------------------	-------------------------	-------------------------	-----------------------

4,8307·10¹⁷ , % вес 90 92,5 95 При математическом описании реактора приняты следующие допущения: 1) аэродинамическая обстановка близка к идеальному вытеснению; 2) тепловой режим адиабатический; 3) радиальный перенос вещества и тепла отсутствует. Уравнение материального баланса по ключевым компонентам н-пентану и изопентану [5] , (7) . (8) Уравнение теплового баланса (9) При : , , . При гидрокрекинге одной молекулы н-пентана или изопентана образуются две молекулы легких углеводородов (, в уравнении (4) равны 2), и на их образование расходуется соответственно одна молекула водорода. Уравнения материального баланса по легким углеводородам и водороду [5] , (10) , (11) (12) В уравнениях (7) (9) множитель определяется из выражения , (13) . (14) Константа равновесия реакции изомеризации аппроксимируется уравнением . (15) Конверсия (, %) и селективность (, %) реакции определяются по уравнениям , (16) . (17) В уравнениях: , , , - мольный поток н-пентана, изопентана, продуктов гидрокрекинга, водорода соответственно (верхний индекс относится к начальным условиям); , , - тепловые эффекты скоростей реакций изомеризации, гидрокрекинга н-пентана и изопентана, ; - текущая относительная длина реактора (); - теплоемкость газосырьевой смеси, ; - суммарный поток газосырьевой смеси, ; - весовая загрузка катализатора, ; - поток сырья в реактор, ; - поток водородосодержащего газа в реактор, ; - плотность водородосодержащего газа, . Таким образом, уравнения (6-17) составляют математическую модель реактора. Математическая модель смесителя Математическая модель предназначена для учета смешения потоков в емкостях и трубных соединениях. Тепловой эффект смешения не учитывается. Количество и состав выходного потока рассчитывается по формулам , (18) , (19) где - содержание -го компонента в -ом выходном потоке, вес. доли, - количество -го входного потока, . Температура выходного потока рассчитывается итерационно из уравнения , (20) где - температура -го входного потока, , - теплоемкость -го входного потока, - теплоемкость выходного потока, . Уравнения (18-20) составляют математическую модель смесителя. Математическая модель рекуператора Математическая модель предназначена для вычисления выходных температур потока ГСС (поток 3) и потока реакторных газов (поток 6), которые участвуют в теплообмене в рекуператоре. Температура реакторных газов и ГСС на выходе из рекуператора рассчитываются по формулам [5] , (21) , (22) , , , где - температура теплоносителя, , - функция тепловой эффективности, - функции водяных эквивалентов, - число единиц переноса тепла, - расход теплоносителя, кг/ч, - площадь теплопередачи, м², - коэффициент потерь, - коэффициент теплопередачи, кДж/ м², - индекс противоточности, верхние индексы - поток реакторных газов, - поток ГСС, нижние индексы , - входной и выходной параметры потока. Математическая модель нагревательной печи Математическая модель предназначена для расчета расхода топливного газа в печи, , обеспечивающего заданный перепад температуры нагреваемой ГСС.

Расход топливного газа определяется из уравнения теплового баланса печи , (23) где \bar{c}_p – средняя теплоемкость смеси в интервале температур, ΔT – теплотворная способность топлива, η – КПД печи, $G_{\text{ГСС}}$ – количество ГСС, поступающей в печь, $G_{\text{газ}}$ – расход топливного газа.

Постановка задачи В качестве неопределенных параметров выбраны параметры математической модели, которые послужили настроечными параметрами в процессе идентификации математической модели реактора. Это предэкспоненциальные коэффициенты в уравнениях Аррениуса (6), $k_1, k_2, k_3, k_4, k_5, k_6, k_7, k_8, k_9, k_{10}, k_{11}, k_{12}, k_{13}, k_{14}, k_{15}, k_{16}, k_{17}, k_{18}, k_{19}, k_{20}, k_{21}, k_{22}, k_{23}, k_{24}, k_{25}, k_{26}, k_{27}, k_{28}, k_{29}, k_{30}, k_{31}, k_{32}, k_{33}, k_{34}, k_{35}, k_{36}, k_{37}, k_{38}, k_{39}, k_{40}, k_{41}, k_{42}, k_{43}, k_{44}, k_{45}, k_{46}, k_{47}, k_{48}, k_{49}, k_{50}, k_{51}, k_{52}, k_{53}, k_{54}, k_{55}, k_{56}, k_{57}, k_{58}, k_{59}, k_{60}, k_{61}, k_{62}, k_{63}, k_{64}, k_{65}, k_{66}, k_{67}, k_{68}, k_{69}, k_{70}, k_{71}, k_{72}, k_{73}, k_{74}, k_{75}, k_{76}, k_{77}, k_{78}, k_{79}, k_{80}, k_{81}, k_{82}, k_{83}, k_{84}, k_{85}, k_{86}, k_{87}, k_{88}, k_{89}, k_{90}, k_{91}, k_{92}, k_{93}, k_{94}, k_{95}, k_{96}, k_{97}, k_{98}, k_{99}, k_{100}$.

Также в число неопределенных параметров включили концентрацию водорода в ВСГ, C_{H_2} , поскольку водород расходуется на гидрокрекинг, теряется в отдувках ВСГ, циркулирующего в ХТС изомеризации n-пентана, что необходимо для соблюдения молярного соотношения водород:n-пентан, потери водорода происходят при растворении водорода в изомеризате. Кроме того, ВСГ накапливает в себе побочные продукты реакций. Таким образом вектор неопределенных параметров представляет собой \mathbf{p} . Область неопределенности задана в виде $\mathbf{p} \in \mathbf{P}$. Значения \mathbf{p} и \mathbf{P} приведены в таблице 2. В качестве поисковых переменных задачи выбраны: 1) масса загрузки реактора катализатором, $M_{\text{кат}}$, – конструктивный параметр; 2) управляющие параметры: температура на входе в реактор, $T_{\text{вх}}$; расход электролитического водорода, G_{H_2} . В качестве ограничений задачи проектирования оптимального реактора узла изомеризации n-пентана использованы следующие мягкие ограничения: 1) вероятностное ограничение на конверсию, X , (24) 2) вероятностное ограничение на селективность, S , (25) 3) вероятностное ограничение на соотношение водород: nпентан. (26) А также жесткое ограничение на соотношение толщины стенки, диктуемое [13]

Рассмотрим теперь ограничения на управляющие переменные. Для расхода электролитического водорода границы изменения составят $G_{\text{H}_2} \in [G_{\text{H}_2}^{\text{min}}, G_{\text{H}_2}^{\text{max}}]$, (27) для температуры [11]. (28) Ограничения на управляющие переменные являются жесткими ограничениями. Хотя в силу ограничений (24-26) заданная вероятность выполнения соответствующих проектных требований будет соблюдена, при этом теоретически возможны точки области неопределенности, в которых значения ограничений могут не удовлетворять возможным требованиям на качество продукта. В связи с этим добавим следующие жесткие ограничения на конверсию и селективность: $X \geq X_{\text{min}}$, (29) $S \geq S_{\text{min}}$. (30) Ограничения (29), (30) гарантируют выполнение нижней границы проектных требований на конверсию и селективность на всей области неопределенности. В качестве критерия задачи оптимизации мы будем использовать критерий приведенных затрат, включающий капитальные затраты на реактор и алюмоплатиновый катализатор и эксплуатационные затраты на топливный газ и поддержание требуемой концентрации водорода в ВСГ. $J = C_{\text{кат}} M_{\text{кат}} + C_{\text{ст}} M_{\text{ст}} + C_{\text{H}_2} G_{\text{H}_2} + C_{\text{газ}} G_{\text{газ}}$, (31) где $C_{\text{кат}}$ – цена катализатора, $M_{\text{кат}}$ – масса катализатора, $C_{\text{ст}}$ – цена стали, $M_{\text{ст}}$ – необходимая для постройки реактора масса стали, C_{H_2} – цена электролитического водорода, G_{H_2} – весовое количество водорода, содержащееся в ВСГ, $C_{\text{газ}}$ – расход водорода, $G_{\text{газ}}$ – расход топливного газа в печи, $G_{\text{газ}}$ – расход топливного газа.

цена топливного газа, . Исходя из характеристик катализатора ИП-62 ВК [11], определяем срок эксплуатации системы . С учетом проведения ежегодных остановов на планово-предупредительный ремонт среднее время работы ХТС или за все 10 лет работы системы. Итак, задача оптимального проектирования реактора узла производства изопентана формулируется следующим образом: Найти такие значения поисковых переменных , , , при которых значение математического ожидания критерия (31) на области неопределенности будет минимальным, а также будут выполняться ограничения (24-26) с заданной вероятностью и ограничения (27), (28) на всей области неопределенности . Мы будем рассматривать постановку задачи проектирования оптимального реакторного узла в виде двухэтапной задачи оптимизации с жесткими и мягкими ограничениями (1). Формализованная постановка задачи примет вид (32) , , , , , , , , , , , где . Для решения поставленной задачи были использованы предложенные нами подходы и алгоритмы и спроектированный нами программный комплекс. Используя подходы и алгоритмы описанные в настоящей работе была решена задача оптимального проектирования (32), поставленная в настоящей работе. Результат решения приведен в таблице 3. Таблица 3 – Результаты решения задачи (32) Подход Проектирование на основе учета коэффициента запаса Проектирование на основе ДЭЗО Загрузка кат., , 15884,7 13507 Высота реактора, , 11,285 10,691 Диаметр реактора, , 1,881 1,782 Толщина стенок, , 28,04 26,6 Приведенные затраты, 17 070 863 14 637 134 Относит. экономия, 14,26 Оценка экономии за период экспл., – 24 337 290 Полученные результаты сравнивались с подходом проектирования, который традиционно применяется при проектировании аппаратов химической технологии. При данном подходе сначала решается задача номинальной оптимизации без учета имеющейся неопределенности при значениях неопределенных параметров , затем полученные значения конструктивных параметров умножают на соответствующий эмпирический коэффициент запаса (для химической промышленности обычно принимают [14]). Из таб. 3 видно, что учет неопределенности с помощью двухэтапной задачи оптимального проектирования позволил сократить затраты (31) на . Относительная экономия вычисляется по формуле , где – затраты (31) при использовании коэффициента запаса , – затраты (31) при предлагаемом нами подходе проектирования на основе ДЭЗО. Таким образом, оценка экономии за весь период эксплуатации реактора составляет порядка . Решение задачи заняло около трех минут.