

Моделювання процесу алкілування бензолу пропіленом в умовах параметричної невизначеності

Ладієва Л. Р., Козаневич З. Я., Клуста Т. В.

КПІ ім. Ігоря Сікорського

м. Київ, Україна

tanklуста@ukr.net

Анотація—Всі процеси алкілування з достатньою інтенсивністю можливі лише в присутності катализатора. Встановлений вплив зміни стану катализатора. Розроблено математичну модель. Застосування оптимальної системи недоцільно через наявні не прогнозовані збурення. Встановлено, що у присутності хлорид алюмінію виникають побічні реакції. Внаслідок цього змінюється значення передекспоненціального множника та енергії активації. Розглянуто синтез H_{∞} робастного регулятора.

Ключові слова—алкілування, хлорид алюмінію, побічні реакції, передекспоненціальний множник, енергія активації, робастний регулятор.

Вступ

Сучасні технології алкілування представлені широким класом різноманітних промислових процесів. Серед проблем загальних для всіх процесів алкілування можна відзначити наявність супутніх побічних реакцій, що призводять до зниження селективності процесу і погіршення якості продукції, а також застосування морально застарілих рідких кислотних катализаторів, що призводить до більш швидкого зносу обладнання внаслідок корозії, а також високу небезпеку виробництва і необхідність суворо дотримуватись норм технологічного регламенту. Через це в даний час перед нафтопереробними заводами гостро стоїть проблема підвищення ефективності виробництва алкілата.

МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ ПРОЦЕСУ АЛКІЛУВАННЯ БЕНЗОЛУ ПРОПІЛЕНОМ

Всі процеси алкілування з достатньою інтенсивністю можливі тільки в присутності катализаторів. Останні, в свою чергу поділяють на твердофазні та рідкофазні. Залежно від катализатора змінюється технологічне оформлення процесу [1].

Так, для алкілування бензолу пропіленом часто використовуються комплекси хлористого алюмінію $AlCl_3$, в розчині бензолу або алкілбензольної фракції. Застосування даного катализатора призводить до отримання кращих виходів, ніж при застосуванні кислотних катализаторів. Використання $AlCl_3$ у крекінг-процесі засноване, перш за все, на здатності цього катализатора розщеплювати вуглеводні з довгим ланцюгом на

молекули меншого розміру, завдяки чому підвищується якість виходу продукту. Питома електропровідність катализатора характеризує його активність, яка є важливим показником для процесу, тому що, технологія алкілування бензолу пропіленом побудована таким чином, що катализатор, який не вступив в реакцію повертається назад в цикл процесу.

В результаті обробки великого масиву експериментальних даних було встановлено, що підтримка активності поверненого каталітичного комплексу регулюється витратою свіжого катализатора і в результаті залежить від витрати повернутого катализатора, його активності, а також активності свіжого каталітичного комплексу в такий спосіб. Внаслідок цього є необхідність параметра, який враховує зміну стану катализатора [2, 3]. Для керування процесом алкілування бензолу пропіленом у рідкій фазі розроблена математична модель:

- 1) Матеріальний баланс для акумулюючої ємності реакційної маси в алкілаторі при мольних значеннях концентрації:

$$-F_a \cdot x_a + v \cdot \rho \cdot \frac{M_a}{M_p} k \cdot \exp\left(-\frac{E}{R \cdot \Theta}\right) \cdot x_{p1} = v \cdot \rho \frac{dx_a}{dt}$$

- 2) Тепловий баланс реакційної маси:

$$F_b \cdot c_b \cdot \Theta_b + F_p \cdot c_p \cdot \Theta_p - F_a \cdot c_a \cdot \Theta - K \cdot S_1 \left(\Theta - \frac{\Theta_v + \Theta_{v1}}{2} \right) - F_{b1} \cdot r + S \cdot \rho \cdot \frac{M_a}{M_p} k \cdot \exp\left(-\frac{E}{R \cdot \Theta}\right) \cdot x_{p1} \cdot q = v \cdot \rho \cdot c_a \frac{d\Theta}{dt}$$

- 3) Тепловий баланс по температурі води, яка подається на охолодження:

$$F_v \cdot c_v (\Theta_v - \Theta_{v1}) + K S_1 \left(\Theta - \frac{\Theta_{v1} + \Theta_v}{2} \right) = v_v \cdot \rho_v \cdot c_v \frac{d}{dt} \left(\frac{\Theta_v - \Theta_{v1}}{2} \right),$$

де $F_b, F_{b1}, F_p, F_a, F_v, F_{v1}$ – витрати бензолу на вході в апарат і випарованого; пропілену; продуктів реакції; води на охолодження на вході та виході, кг/с; k – передекспоненціальний множник;

E – енергія активації, кДж/моль; R – універсальна газова стала, Дж/мольК; Θ_b , Θ_p , Θ , Θ_v , Θ_{v1} – температури бензолу і пропілену; парогазової суміші; реакційної маси в реакторі; води на вході і виході, К; x_b , x_p , x_a , x_{p1} , – концентрації бензолу і пропілену на вході і алкілату на виході, пропан-пропіленової фракції на виході, %; M_a , M_p – молярна маса алкілату та пропілену, кг/гмоль; q – питома тепло реакції, Дж/кг; c_v , c_a – питома теплоємність води та алкілату, Дж/(кгК), м/с; r – питома теплота пароутворення бензолу, Дж/кг; ρ , ρ_v – густина в алкілаторі; води, кг/м³; v , v_v – об'єм в апараті; води, м³; KS_1 – добуток коефіцієнта теплопередачі на площу алкілатора, Дж/(сК); S – площа теплопередачі, м²; A – коефіцієнт, який враховує зміну стану каталізатора (діапазон від 0 до 1).

Для даної моделі була розроблена оптимальна система керування. На основі розв'язання матричного диференційного рівняння Рікати та знаходження оптимального керування [4, 5]. Але досвід застосування оптимальних систем за квадратичним критерієм якості показав їх чутливість до параметрів процесу реального об'єкта. Такі системи виявились негрубими, що приводить до втрати ними не лише оптимальності, а й стійкості і якості.

Тому потрібно врахувати те, що на систему діють не прогнозовані збурення.

МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ ПРОЦЕСУ АЛКІЛУВАННЯ БЕНЗОЛУ ПРОПІЛЕНОМ З ВРАХУВАННЯМ НЕВИЗНАЧЕНОСТІ

Встановлено, що у присутності хлориду алюмінію $AlCl_3$ в складі каталітичного комплексу можуть утворюватись потрібні комплекси не тільки з одним, але і з двома, трьома і так далі вуглеводними радикалами. Комплекси можуть вступати в обмінні реакції не тільки з бензолом, але і з продуктами реакції, наприклад, з діпропілбензолом, тоді відбувається процес переалкілування та виникає значна кількість побічних реакцій [6]. Внаслідок цих реакцій змінюється значення передекспоненціального множника та енергії активації в рівнянні Арреніуса. Представлена математична модель процесу зі змінними коефіцієнтами, які враховують невизначеності:

$$\begin{aligned} \frac{\partial x_a}{\partial t} = & \left(-1,1 \cdot 10^{-26} \cdot e^{\frac{E}{8,31 \cdot \Theta}} \left(6,8 \cdot 10^{43} \cdot A \cdot k \cdot e^{-\frac{E}{8,31 \cdot \Theta}} + \right. \right. \\ & \left. \left. + 5,43 \cdot A \cdot k^2 \cdot e^{-\frac{2 \cdot E}{8,31 \cdot \Theta}} + 2,2 \cdot 10^{43} \right)^{1/2} - 7,1 \cdot 10^{-4} \cdot e^{\frac{E}{8,31 \cdot \Theta}} - \right. \\ & \left. - 1,4 \cdot 10^{-4} \cdot A \cdot k^2 \right) \cdot x_a + \left(-\frac{105 \cdot A \cdot k}{\Theta^2} \right) \cdot \Theta; \\ \frac{\partial \Theta}{\partial t} = & \left(3,6 \cdot 10^{19} \cdot A \cdot k \cdot e^{-\frac{E}{8,1 \cdot \Theta}} + 2,4 \cdot 10^{20} \cdot A \cdot k^2 \cdot e^{-\frac{2 \cdot E}{8,1 \cdot \Theta}} - \right. \\ & \left. - 3,3 \cdot 10^{16} \cdot \Theta \cdot A \cdot k \cdot e^{-\frac{E}{8,31 \cdot \Theta}} + 4,7 \cdot 10^{17} \right)^{1/2} \times \\ & \times \left(-1,2 \cdot 10^{-14} \cdot e^{\frac{E}{8,31 \cdot \Theta}} - 1,9 \cdot 10^{-4} \cdot A \cdot k - 8,6 \cdot 10^{-6} \cdot e^{\frac{E}{8,31 \cdot \Theta}} \right) \times \\ & \times x_a + \left(\frac{109,4 \cdot A \cdot k - 510,3}{\Theta^2} \right) \times \end{aligned}$$

$$\times \Theta + 2,8 \cdot 10^{-3} \cdot \Theta_v + (0,081 - 1,995 \cdot 10^{-4} \cdot \Theta) \cdot F_p;$$

$$\frac{\partial \Theta_v}{\partial t} = -5,82 \cdot 10^{-3} \cdot \Theta + (-6,81 \cdot 10^{-5} \cdot \Theta + 4,75 \cdot 10^{-3}) \cdot \Theta_v.$$

Зміна властивостей каталізатора і наявність побічних реакцій впливають на швидкість реакції алкілування бензолу.

ВИСНОВКИ

Проведено аналіз впливу невизначеності параметрів математичної моделі процесі. Розглянуто синтез H_∞ робастного регулятора, що забезпечує роботу апарату в умовах зміни властивостей каталізатора і побічних реакцій в процесі експлуатації. Підтримання заданої концентрації алкілбензолу на виході забезпечується зміною витрати пропілену.

ЛІТЕРАТУРА

- [1] Юкельсон И. И. Технология основного органического синтеза [Текст]: учеб. пособие / И. И. Юкельсон; под ред. Урываева Н. И. – М.: Химия, 1968. – 848 с. – Библиогр.: с. 239–245.
- [2] Хлебникова Е.С., Л.С. Игнатова, Е.Н. Ивашкина Моделирование промышленного процесса алкилирования бензола этиленом на алюмохлористом катализаторе. // Уфимский государственный нефтяной технический университет (УГНТУ). – 2015. – Т. 1. – С. 228–229.
- [3] Хлебникова Е.С., Ивашкина Е.Н., Паппел К.Х. Оптимизация процесса смешения реагентов в технологии получения этилбензола с использованием гидродинамической модели // Мир нефтепродуктов. Вестник нефтяных компаний. – 2016. – № 9. – С. 30–35.
- [4] Klusta Tatyana, Kozanevych Zvenyslava, Ladieva Lesia Optimal control of benzene alkyd process by propylene in liquid phase. The Faculty of Mechanical Engineering and Computer Science of the University in Bielsko-Biala. The International Scientific Conference „Engineer of XXI Century”. (Wydawnictwo Naukowe Akademii Techniczno-Humanistycznej w Bielsku-Biaej, 6 grudnia 2019). Bielsko-Biala, 2019. Pages 193–200, ISBN: 978-83-66249-23-3.
- [5] Ладієва Л. Р., Козаневич З. Я., Клушта Т. В. Optimal control of benzene alkyd process by propylene in liquid phase. Materials of the XVI International scientific and practical Conference Science and civilization - 2020 , 30 January - 07 February , 2020: Sheffield. Science and education LTD -100 p., ISBN 978-966-8736-05-6
- [6] Клушта Т. В., Ладієва Л. Р. Козаневич З. Я. Дослідження не прогнозованих збурень на процес алкілування бензолу пропіленом у рідкій фазі. Автоматизація та комп'ютерно-інтегровані технології – 2020 : Матеріали VII Міжнародної науково-практичної конференції молодих учених, аспірантів і студентів (АКІТ-2020); м. Київ, 22 квітня 2020 р. / уклад. М. В. Лукінок. – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, Видво «Політехніка», 2020. – 128 с. : іл. ISBN 978-966-622-995-6