

УДК: 519.876.5

СИНТЕЗ ЦИФРОВОГО ЭКВИВАЛЕНТА АСУ ПРОЦЕССОМ ДЕГИДРИРОВАНИЯ ЭТИЛБЕНЗОЛА

© 2024 г. А. П. Попов^а, С. Г. Тихомиров^а, С. Л. Подвальный^б,
О. В. Карманова^а, * В. К. Битюков^а, О. Г. Неизвестный^а

^а Воронежский государственный университет инженерных технологий, Воронеж, Россия

^б Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия

* e-mail: karolga@mail.ru

Поступила в редакцию 14.12.2023 г.

После доработки 15.04.2024 г.

Принята к публикации 16.04.2024 г.

В статье рассмотрены основные этапы эволюции математической модели, физико-химических стадий каталитического дегидрирования этилбензола в производстве стирола. Представлены новые структурные элементы математической модели, описывающие теплообменные и химические процессы, протекающие при дегидрировании этилбензола. Введение дополнительных математических зависимостей позволило снизить количество структурных и параметрических неопределенностей ранее известных моделей кинетики дегидрирования. Создана система логически взаимосвязанных моделей как основа цифрового эквивалента автоматизированной системы управления процессом. Описан синтез цифрового эквивалента системы предиктивного управления в рамках концепции модельно-ориентированного проектирования. Предложена методика синтеза иерархических моделей химико-технологических систем. Выполнена программная эмуляция автоматизированной системы управления исследуемого процесса. Приведены результаты компьютерной реализации цифрового эквивалента в виде прогнозных траекторий изменения параметров состояния технологического процесса, реакционной среды и катализатора.

Ключевые слова: дегидрирование этилбензола, имитационная модель, цифровой эквивалент, предиктивное управление

DOI: 10.31857/S0040357124020116, **EDN:** CTLSSM

ВВЕДЕНИЕ

На протяжении последних 50 лет повышение энергоэффективности и производительности химических производств относится к числу наиболее актуальных проблем химической технологии. До недавнего времени решение данных задач осуществлялось путем изучения закономерностей протекания химических превращений, в том числе с использованием методов математического моделирования и усовершенствования автоматизированных систем управления (АСУ) [1].

Новая концепция трансформации химико-технологических систем (ХТС) и предприятий нефтехимической отрасли основана на объединении ранее используемых способов и цифровых технологий четвертой промышленной революции [2, 3]. Современный этап развития предполагает широкое использование имитационных моделей как основы цифровых эквивалентов (ЦЭ) технологических процессов, аппаратов, производственных участков и готовой продукции для интенсификации производств [4–6].

Создание ЦЭ производится с целью получения цифрового эквивалента (двойника) как инструмента прогнозирования динамики параметров состояния исследуемого процесса и проведения многокритериальной оптимизации параметров управления [7].

Цифровые двойники являются одной из технологий-агрегаторов индустрии 4.0. Существуют различные виды и способы их классификаций. Применительно к цифровой трансформации ХТС важную роль играет способ создания такого двойника. Выделяют два подхода к разработке его математической основы. Первый заключается в создании статистических моделей и моделей машинного обучения, которые выполняют обработку и анализ большого объема данных, поступающих от измерительных приборов и каналов передачи информации между элементами управления технологическим процессом. Второй заключается в разработке высокоточных имитационных моделей, адекватно описывающих физические и химические аспекты технологических

процессов на основе фундаментальных законов сохранения.

Для повышения эффективности ХТС, относящихся к классу систем с нелинейной кинетикой, статистические модели и/или модели машинного обучения не предоставляют информации, которая была бы достаточной с точки зрения оптимальной организации сложных ХТС и взаимодействия элементов систем управления [8]. Это в первую очередь связано с тем, что имеющаяся выборка данных ограничена по диапазону изменения параметров состояния системы. Данные модели обрабатывают информацию, получаемую во время эксплуатации, и не в состоянии прогнозировать все возможные динамические, в том числе не повторяющиеся режимы с учетом особенностей процессов: молекулярной динамики, химической термодинамики, фазовых переходов, реакций, протекающих на разделе фаз и на микроуровне.

К такому виду процессов относится каталитическое дегидрирование этилбензола в производстве стирола. Специфика и сложность данной ХТС обуславливает необходимость использования цифрового эквивалента АСУ для повышения ее эффективности. Существующие математические модели рассматриваемой ХТС не могут быть использованы в качестве основы ЦЭ, так как они не учитывают всей совокупности параметров состояния реакционной смеси при их изменении во времени и пространстве.

В качестве основы ЦЭ целесообразно использовать комплекс математических описаний взаимосвязанных физико-химических процессов, позволяющих имитировать и проводить оптимизацию технологических режимов производства. Поэтому для синтеза полноценного цифрового эквивалента ХТС целесообразно использовать математическое моделирование кинетики химических превращений, массообменных и теплообменных процессов [9–12]. Таким образом, целью исследования является применение данного подхода к созданию имитационной модели процесса дегидрирования и использование ее при программной эмуляции предиктивной системы управления данным процессом.

МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ ПРОЦЕССА ДЕГИДРИРОВАНИЯ

Объектом математического моделирования является эндотермический процесс дегидрирования этилбензола, протекающий в реакторе шахтного типа с неподвижным слоем катализатора. Режим работы реактора – адиабатический. Структурная схема процесса как объекта управления представлена на рис. 1. ХТС включает в себя

следующие стадии: нагрев водяного пара в пароперегревательной печи, смешение водяного пара с парами этилбензольной шихты в смесительной камере реактора и каталитическое дегидрирование в реакционной зоне. Основными управляющими воздействиями являются расходы теплоносителей: топливного газа и водяного пара. Данные параметры непосредственно влияют на температурный режим протекания процесса и активность каталитического слоя. Основным внутренним неизмеряемым возмущающим воздействием является отложение кокса на поверхности катализатора, что влечет за собой снижение его активности и основных производственных показателей. Управляемыми параметрами являются: концентрация стирола на выходе и конверсия сырья.

Для решения задачи стабилизации концентрации целевого продукта на заданном уровне целесообразно использовать управление, основанное на имитационных моделях, так как это позволит осуществлять оперативную оценку величины неизменяемого возмущающего воздействия с целью его компенсации. Эффективным каналом управления в данном случае является изменение температуры водяного пара, обеспечивающее повышение температуры реакционной смеси по мере снижения активности слоя катализатора.

Математическое моделирование процесса каталитического дегидрирования требует углубленного исследования влияния ранее не учитываемых факторов и физических параметров реакционной среды на кинетику химических превращений и динамику протекания процесса. Для этого разработаны математические модели физических процессов, протекающих во время дегидрирования [13–15]. При синтезе модели учтены следующие аспекты:

- рассмотрен наиболее вероятный механизм образования побочных продуктов при отделении водорода от пароэтилбензольной смеси;
- определен вид зависимостей, описывающих изменение теплоемкостей компонентов среды от температуры реакции;
- осуществлен учет снижения температуры смеси и изменения теплоемкостей ее компонентов по длине реакторной ступени;
- реакционная смесь рассмотрена как система взаимодействующих газов;
- оценка величин констант скоростей выполнена с учетом изменения по длине реакторной ступени общего объема и парциальных параметров состояния всей смеси и каждого из ее компонентов;
- осуществлены учет динамики распределения кокса по каталитическому слою реактора,

интегральная оценка общего количества образовавшихся углеродных отложений и активности катализатора.

Таким образом, математическая модель процесса представляет собой следующую систему дифференциальных уравнений (1):

$$\begin{cases}
 \nu \frac{dn^A}{dl} = a(l) \cdot k_1(l) \cdot \frac{\sum G^i(l) \cdot V^{sm}(l) \cdot P^B(l)}{P^{sm}} - \frac{k_2(l)}{V^{sm}(l)} \cdot \frac{\sum G^i(l)^2 \cdot V^{sm}(l)^2 \cdot P^A(l) \cdot P^C(l)}{P^{sm^2}} - \\
 - k_8(l) \cdot \frac{\sum G^i(l) \cdot V^{sm}(l) \cdot P^A(l)}{P^{sm}}, \\
 \nu \frac{dn^B}{dl} = \frac{k_2(l)}{V^{sm}(l)} \cdot \frac{\sum G^i(l)^2 \cdot V^{sm}(l)^2 \cdot P^A(l) \cdot P^C(l)}{P^{sm^2}} - a(l) \cdot k_1(l) \cdot \frac{\sum G^i(l) \cdot V^{sm}(l) \cdot P^B(l)}{P^{sm}} - \\
 - k_3(l) \cdot \frac{\sum G^i(l) \cdot V^{sm}(l) \cdot P^B(l)}{P^{sm}} - \frac{k_4(l)}{V^{sm}(l)} \cdot \frac{\sum G^i(l)^2 \cdot V^{sm}(l)^2 \cdot P^B(l) \cdot P^C(l)}{P^{sm^2}}, \\
 \nu \frac{dn^C}{dl} = a(l) \cdot k_1(l) \cdot \frac{\sum G^i(l) \cdot V^{sm}(l) \cdot P^B(l)}{P^{sm}} - \frac{k_2(l)}{V^{sm}(l)} \cdot \frac{\sum G^i(l)^2 \cdot V^{sm}(l)^2 \cdot P^A(l) \cdot P^B(l)}{P^{sm^2}} - \\
 - \frac{k_4(l)}{V^{sm}(l)} \cdot \frac{\sum G^i(l)^2 \cdot V^{sm}(l)^2 \cdot P^B(l) \cdot P^C(l)}{P^{sm^2}} + k_5(l) \cdot 2 \cdot \frac{\sum G^i(l) \cdot V^{sm}(l) \cdot P^G(l)}{P^{sm}} + \\
 + \frac{k_6(l)}{V^{sm}(l)} \cdot 3 \cdot \frac{\sum G^i(l)^2 \cdot V^{sm}(l)^2 \cdot P^G(l) \cdot P^P(l)}{P^{sm^2}} - \frac{k_7(l)}{V^{sm}(l)} \cdot 6 \cdot \frac{\sum G^i(l)^2 \cdot V^{sm}(l)^2 \cdot P^K(l) \cdot P^C(l)}{P^{sm^2}} + \\
 + \frac{k_9(l)}{V^{sm}(l)} \cdot 4 \cdot \frac{\sum G^i(l)^2 \cdot V^{sm}(l)^2 \cdot P^H(l) \cdot P^P(l)}{P^{sm^2}} - \frac{k_{10}(l)}{V^{sm}(l)} \cdot 24 \cdot \frac{\sum G^i(l)^2 \cdot V^{sm}(l)^2 \cdot P^E(l) \cdot P^P(l)}{P^{sm^2}}, \\
 \nu \frac{dn^D}{dl} = k_3(l) \cdot \frac{\sum G^i(l) \cdot V^{sm}(l) \cdot P^B(l)}{P^{sm}}, \\
 \nu \frac{dn^E}{dl} = k_3(l) \cdot \frac{\sum G^i(l) \cdot V^{sm}(l) \cdot P^B(l)}{P^{sm}} - \frac{k_{10}(l)}{V^{sm}(l)} \cdot 4 \cdot \frac{\sum G^i(l)^2 \cdot V^{sm}(l)^2 \cdot P^E(l) \cdot P^P(l)}{P^{sm^2}}, \\
 \nu \frac{dn^F}{dl} = \frac{k_4(l)}{V^{sm}(l)} \cdot \frac{\sum G^i(l)^2 \cdot V^{sm}(l)^2 \cdot P^B(l) \cdot P^C(l)}{P^{sm^2}} + k_8(l) \cdot \frac{\sum G^i(l) \cdot V^{sm}(l) \cdot P^A(l)}{P^{sm}}, \\
 \nu \frac{dn^G}{dl} = \frac{k_4(l)}{V^{sm}(l)} \cdot \frac{\sum G^i(l)^2 \cdot V^{sm}(l)^2 \cdot P^B(l) \cdot P^C(l)}{P^{sm^2}} - k_5(l) \cdot \frac{\sum G^i(l) \cdot V^{sm}(l) \cdot P^G(l)}{P^{sm}} - \\
 - \frac{k_6(l)}{V^{sm}(l)} \cdot \frac{\sum G^i(l)^2 \cdot V^{sm}(l)^2 \cdot P^G(l) \cdot P^P(l)}{P^{sm^2}} + \frac{k_7(l)}{V^{sm}(l)} \cdot 2 \cdot \frac{\sum G^i(l)^2 \cdot V^{sm}(l)^2 \cdot P^K(l) \cdot P^C(l)}{P^{sm^2}}, \\
 \nu \frac{dn^H}{dl} = k_5(l) \cdot \frac{\sum G^i(l) \cdot V^{sm}(l) \cdot P^G(l)}{P^{sm}} + k_8(l) \cdot \frac{\sum G^i(l) \cdot V^{sm}(l) \cdot P^A(l)}{P^{sm}} - \\
 - \frac{k_9(l)}{V^{sm}(l)} \cdot 2 \cdot \frac{\sum G^i(l)^2 \cdot V^{sm}(l)^2 \cdot P^H(l) \cdot P^P(l)}{P^{sm^2}}, \\
 \nu \frac{dn^K}{dl} = \frac{k_6(l)}{V^{sm}(l)} \cdot \frac{\sum G^i(l)^2 \cdot V^{sm}(l)^2 \cdot P^G(l) \cdot P^P(l)}{P^{sm^2}} - \frac{k_7(l)}{V^{sm}(l)} \cdot 2 \cdot \frac{\sum G^i(l)^2 \cdot V^{sm}(l)^2 \cdot P^K(l) \cdot P^C(l)}{P^{sm^2}}, \\
 \nu \frac{dn^M}{dl} = \frac{k_9(l)}{V^{sm}(l)} \cdot 2 \cdot \frac{\sum G^i(l)^2 \cdot V^{sm}(l)^2 \cdot P^H(l) \cdot P^P(l)}{P^{sm^2}} + \frac{k_{10}(l)}{V^{sm}(l)} \cdot 8 \cdot \frac{\sum G^i(l)^2 \cdot V^{sm}(l)^2 \cdot P^E(l) \cdot P^P(l)}{P^{sm^2}}, \\
 \nu \frac{dn^P}{dl} = \frac{k_7(l)}{V^{sm}(l)} \cdot 2 \cdot \frac{\sum G^i(l)^2 \cdot V^{sm}(l)^2 \cdot P^K(l) \cdot P^C(l)}{P^{sm^2}} - \frac{k_6(l)}{V^{sm}(l)} \cdot \frac{\sum G^i(l)^2 \cdot V^{sm}(l)^2 \cdot P^G(l) \cdot P^P(l)}{P^{sm^2}} - \\
 - \frac{k_9(l)}{V^{sm}(l)} \cdot 2 \cdot \frac{\sum G^i(l)^2 \cdot V^{sm}(l)^2 \cdot P^H(l) \cdot P^P(l)}{P^{sm^2}} + \frac{k_{10}(l)}{V^{sm}(l)} \cdot 8 \cdot \frac{\sum G^i(l)^2 \cdot V^{sm}(l)^2 \cdot P^E(l) \cdot P^P(l)}{P^{sm^2}}, \\
 \frac{dT^{sm}}{dl} = - \frac{\Delta H \cdot w^A}{c^{sm}(l) \cdot \nu}
 \end{cases} \quad (1)$$

Решение системы уравнений (1) осуществлено при следующих начальных условиях:

$$\left\{ \begin{aligned} c^P|_{l=0} &= \left(a^P \cdot (T^{vp}|_{l=0})^3 + b^P \cdot (T^{vp}|_{l=0})^2 + g^P \cdot (T^{vp}|_{l=0}) + d^P \right) \cdot (M^P)^{-1}, \quad i = \overline{1, \dots, w} \\ c^{sm}|_{l=0} &= \sum_{i=1}^w (c^i|_{l=0} \cdot m^i|_{l=0}), \quad i = \overline{1, \dots, w}, \\ T^{sm}|_{l=0} &= \frac{c^{sh}|_{l=0} \cdot m^{sh} \cdot T^{sh}|_{l=0} + c^P|_{l=0} \cdot m^{vp} \cdot T^{vp}|_{l=0}}{c^{sh}|_{l=0} \cdot m^{sh} + c^P|_{l=0} \cdot m^{vp}}, \\ V^{sm}|_{l=0} &= \frac{\sum_{i=1}^w n^i|_{l=0} \cdot R \cdot T^{sm}|_{l=0}}{P^{sm}}, \quad i = \overline{1, \dots, w} \\ G^i|_{l=0} &= \frac{n^i|_{l=0}}{V^{sm}|_{l=0}}, \quad i = \overline{1, \dots, w} \\ n^A|_{l=0} &= n^C|_{l=0} = n^E|_{l=0} = n^G|_{l=0} = n^H|_{l=0} = n^K|_{l=0} = n^M|_{l=0} = 0, \\ n^B|_{l=0} &= 0.998 \cdot m^{sh} / M^B, \quad n^D|_{l=0} = 0.001 \cdot m^{sh} / M^D, \\ n^F|_{l=0} &= 0.001 \cdot m^{sh} / M^F, \quad n^P|_{l=0} = m^{vp} / M^P. \end{aligned} \right. \quad (2)$$

Константы скоростей химических реакций в системе (1) определяются в соответствии с формулами (3)–(13).

$$k_1(l) = k_1^0 \cdot e^{\frac{-Ea+Vp^B(l) \cdot P^B(l)}{R \cdot T^{sm}(l)}}, \quad (3)$$

$$kc(l) = 9.23 \cdot 10^{-11} \cdot T^{sm}(l)^4 - 2.98 \cdot 10^{-6} \cdot T^{sm}(l)^3 + 3.62 \cdot 10^{-3} \cdot T^{sm}(l)^2 - 1.96 \cdot T^{sm}(l) + 398.81, \quad (4)$$

$$k_2(l) = \frac{k_1(l)}{kc(l) \cdot e^{\frac{-Ea+Vp^A(l) \cdot P^A(l)+Vp^C(l) \cdot P^C(l)}{R \cdot T^{sm}(l)}}}, \quad (5)$$

$$k_3(l) = k_3^0 \cdot e^{\frac{-Ea+Vp^B(l) \cdot P^B(l)}{R \cdot T^{sm}(l)}}, \quad (6)$$

$$k_4(l) = k_4^0 \cdot e^{\frac{-Ea+Vp^B(l) \cdot P^B(l)+Vp^C(l) \cdot P^C(l)}{R \cdot T^{sm}(l)}}, \quad (7)$$

$$k_5(l) = k_5^0 \cdot e^{\frac{-Ea+Vp^G(l) \cdot P^G(l)}{R \cdot T^{sm}(l)}}, \quad (8)$$

$$k_6(l) = k_6^0 \cdot e^{\frac{-Ea+Vp^G(l) \cdot P^G(l)+Vp^P(l) \cdot P^P(l)}{R \cdot T^{sm}(l)}}, \quad (9)$$

$$k_7(l) = k_7^0 \cdot e^{\frac{-Ea+Vp^K(l) \cdot P^K(l)+Vp^C(l) \cdot P^C(l)}{R \cdot T^{sm}(l)}}, \quad (10)$$

$$k_8(l) = k_8^0 \cdot e^{\frac{-Ea+Vp^A(l) \cdot P^A(l)}{R \cdot T^{sm}(l)}}, \quad (11)$$

$$k_9(l) = k_9^0 \cdot e^{\frac{-Ea+Vp^H(l) \cdot P^H(l)+Vp^P(l) \cdot P^P(l)}{R \cdot T^{sm}(l)}}, \quad (12)$$

$$k_{10}(l) = k_{10}^0 \cdot e^{\frac{-Ea+Vp^E(l) \cdot P^E(l)+Vp^P(l) \cdot P^P(l)}{R \cdot T^{sm}(l)}}. \quad (13)$$

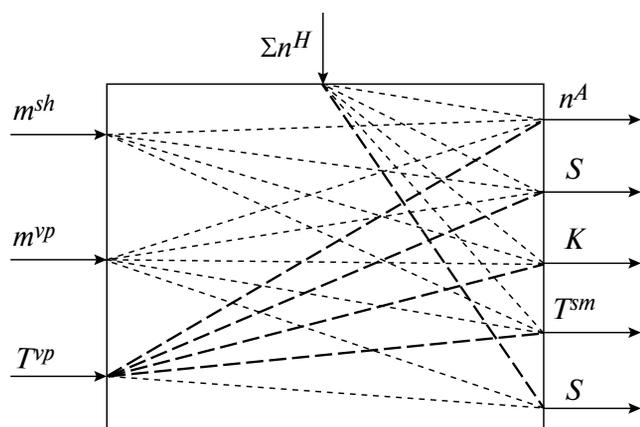


Рис. 1. Структурная схема объекта управления.

Оценка текущего состояния параметров реакционной смеси осуществляется в соответствии с результатами, полученными при решении системы (1), по следующим зависимостям:

$$c^i(l) = \left(a^i \cdot T^{sm}(l)^3 + b^i \cdot T^{sm}(l)^2 + g^i \cdot T^{sm}(l) + d^i \right) \cdot (M^i)^{-1}, \quad (14)$$

$$i = \overline{1, \dots, w}$$

$$c^{sm}(l) = \sum_{i=1}^w (m^i(l) \cdot c^i(l)), \quad i = \overline{1, \dots, w}, \quad (15)$$

$$a(l) = \exp \left(- \frac{\int_0^l n^H(l) dl}{c^{max}} \right), \quad (16)$$

$$V^{sm}(l) = V^{sm}(l - \Delta l) \times \left(1 + \frac{n^{sm}(l) - n^{sm}(l - \Delta l)}{n^{sm}(l - \Delta l)} \right), \quad (17)$$

$$P^i(l) = \frac{n^i(l) \cdot R \cdot T^{sm}(l)}{V^{sm}(l) - \frac{R \cdot T_{crit}^i}{P_{crit}} \cdot n^i(l)} - \quad (18)$$

$$- \frac{3.375 \cdot R \cdot T_{crit}^i \cdot \frac{R \cdot T_{crit}^i}{P_{crit}} \cdot n^i(l)^2}{V^{sm}(l)^2} \quad i = \overline{1, \dots, w},$$

$$K(l) = \frac{\left(\sum_{i=1}^{w-1} n^i|_{l=0} - n^B(l) \right) \cdot 100}{\sum_{i=1}^{w-1} n^i|_{l=0}}, \quad (19)$$

$$S(l) = \frac{n^A(l) \cdot 100}{\left(\sum_{i=1}^{w-1} n^i|_{l=0} - n^B(l) \right)}. \quad (20)$$

Таким образом, получена имитационная модель кинетики дегидрирования этилбензола с распределенными по длине реактора параметрами: температура, теплоемкость (15), объем (17) и давление (18) смеси, теплоемкости (14), парциальные давления, молярные парциальные объемы реагентов, константы скоростей реакций (3–13), активность катализатора (16).

МЕТОДИКА СИНТЕЗА ЦИФРОВОГО ЭКВИВАЛЕНТА АСУ

Создание модели физико-химических превращений недостаточно для эффективного прогнозирования состояния реакционной среды и значений производственных показателей при

различных режимах работы. Данную модель целесообразно использовать в совокупности с имитационными моделями контуров автоматизированной системы управления, методом оценки оптимальных значений управляющих параметров, а также с системами поддержки принятия решений [16]. Это обусловлено необходимостью контроля и прогнозирования изменений динамики большого количества параметров состояния реагентов и получаемой продукции [17] при возникновении внешних и внутренних возмущений.

В связи с этим для эффективной адаптации и интеграции математических описаний физических стадий процесса в модель АСУ и дальнейшей ее трансформации в цифровой эквивалент технологического процесса необходимо выработать четкую последовательность действий, операций и процедур, объединяемых в единую методику синтеза цифровых эквивалентов АСУ, что и является ее теоретической основой.

Такая методика создана в процессе решения задачи синтеза цифрового эквивалента АСУ дегидрирования этилбензола. При ее создании использованы методы системного анализа и основные принципы концепции модельно-ориентированного проектирования [18–20]. Последовательность выполнения исследований и вычислительных экспериментов подразделяется на следующие стадии:

1. Математическое моделирование кинетики ХТС.
2. Имитационное моделирование и оптимизация.
 - 2.1. Создание имитационной модели ХТС.
 - 2.2. Интеграция имитационной модели процесса в модель АСУ в качестве функционального элемента, осуществляющего построение прогнозных траекторий динамических режимов.
 - 2.3. Оптимизация параметров технологического процесса и АСУ.
3. Программная эмуляция предиктивного управления процессом дегидрирования.

Реализация имитационной модели АСУ выполнена путем перехода от рассмотренной выше математической модели к имитационному моделированию на ЭВМ для учета изменения параметров функционирования системы как в пространственной, так и во временной областях. Переход во временную область осуществлен посредством ее разбиения на множество интервалов, соизмеримых со средним временем пребывания смеси в ХТС, внутри которых принято допущение о статическом режиме протекания процесса. Это позволило учесть ранее существовавшие структурные и параметрические неопределенности при моделировании процесса

дегидрирования: влияние парциальных параметров смеси на значения констант скоростей реакций, распределение кокса по длине слоя катализатора и изменение величины его активности при различных режимах функционирования ХТС и нагрузках по сырью.

На второй стадии в вычислительной среде осуществляется оценка параметров модели процесса. Параметрическая идентификация осуществлена с использованием генетического алгоритма. Результаты идентификации представлены на рис. 2–3, где представлены рассчитанные производственные показатели, характеризующие эффективность проведения процесса, а также их сравнение с экспериментальными данными.

Погрешность между расчетными и экспериментальными данными составила по конверсии сырья и по селективности катализатора менее 1%. После этого выполнен расчет динамики процесса и имитационное моделирование контура управления температурным режимом протекающего процесса.

Последующая интеграция имитационных моделей процесса и АСУ позволяет осуществлять расчет на ЭВМ величин управляющих воздей-

ствий для реализации алгоритма предиктивного программного управления ХТС. На завершающем этапе второй стадии реализован алгоритм многокритериальной оптимизации, осуществляющий расчет вектора оптимальных управляющих воздействий: расход и температура водяного пара, расход шихты ($u = \{T^{vp}, m^{vp}, m^{sh}\}$).

При этом важное значение приобретает нахождение такой совокупности управляющих параметров, принадлежащих множеству Парето [21], которая обеспечит режим функционирования ХТС при одновременном выполнении всех требований к показателям технологического процесса. В качестве меры эффективности выступает следующая совокупность локальных критериев оптимизации:

$$z_1 = \int_0^t T^{vp} d\tau \xrightarrow{u} \min, \quad (21)$$

$$z_2 = \sum_t \frac{m_t^{vp}}{m_{\min}^{vp}} \xrightarrow{u} \min, \quad (22)$$

$$z_3 = \left(\frac{n_z^A - n_{ras}^A}{n_{\min}^A} \right) \xrightarrow{u} \min, \quad (23)$$

$$n_{\min}^A = n_{ras}^A \text{ if } n_z^A \geq n_{ras}^A$$

$$n_{\min}^A = n_z^A \text{ if } n_z^A < n_{ras}^A$$

$$Z = \sum_{i=1}^3 \alpha_i \cdot z_i \xrightarrow{u} \min. \quad (24)$$

Основой этого алгоритма является разработанная и программно реализованная имитационная модель процесса (1)–(20) в совокупности с генетическим алгоритмом поисковой оптимизации, аппаратом нечеткого интеграла Шоке и нечеткой меры Сугено [22].

Третья стадия включает разработку специализированного программного обеспечения (ПО), предназначенного для исследования и прогнозирования динамики как самого процесса, так и его автоматизированной системы предиктивного управления. Созданные на предыдущей стадии имитационные модели и алгоритм оптимизации являются функциональными модулями ПО, которое может быть использовано в качестве цифрового эквивалента АСУ.

Созданная методика синтеза цифрового эквивалента обеспечивает эволюцию математических моделей в специализированное программное обеспечение, позволяющее воспроизводить реальный процесс на протяжении всего периода его функционирования. Следовательно, предложенная методика выступает в качестве основы

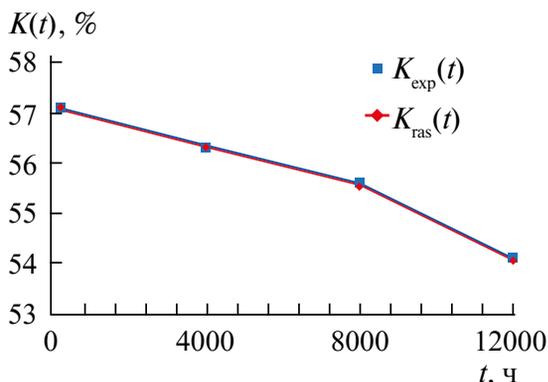


Рис. 2. Изменение величины конверсии этилбензола на протяжении 12000 ч функционирования ХТС.

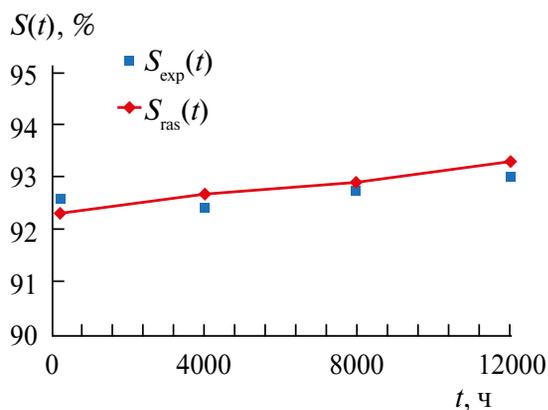


Рис. 3. Изменение величины селективности по стиролу на протяжении 12000 ч функционирования ХТС.

для новой концепции создания цифровых эквивалентов химико-технологических процессов “Иерархическая имитационная модель”. Общая схема данной концепции применительно к процессу дегидрирования этилбензола представлена на рис. 4.

ПРОГРАММНАЯ ЭМУЛЯЦИЯ ЦИФРОВОГО ЭКВИВАЛЕНТА АСУ

С программной точки зрения ЦЭ АСУ является продуктом компоновки ранее реализованных имитационных моделей и алгоритмов. Структура ЦЭ АСУ представляет собой иерархию имитационных моделей, схема которой на рис. 4.

Синтезированный цифровой эквивалент АСУ позволяет описывать и программно эмулировать функциональность автоматизированной системы управления процессом дегидрирования. С использованием данного программного инструмента возможно достоверно воспроизводить и прогнозировать динамику изменения параметров процесса, реакционной среды и катализатора во времени и по длине реактора.

Численные результаты проведенного с использованием ЦЭ АСУ имитационного моделирования динамики процесса и системы предиктивного управления приведены на рис. 5–7.

На рис. 5–6 представлены рассчитанные графики падения активности катализатора в диапазоне изменения данного параметра от 1 до 0 и траектории снижения температуры реакционной смеси в следующие моменты времени: 200, 4000, 8000 и 12000 ч функционирования. Анализ результатов имитационного моделирования показал, что активность катализатора снижается от 1 в начальный момент времени до 0,8 после 12000 ч протекания процесса (рис. 5). Для компенсации падения активности катализатора цифровой эквивалент АСУ осуществляет расчет величины управляющего воздействия, которое обеспечивает повышение температуры реакционной смеси на входе в ХТС (рис. 6).

Результаты имитационного моделирования автоматизированной системы предиктивного управления температурным режимом функционирования ХТС, в сравнении с результатами управления, полученными при использовании

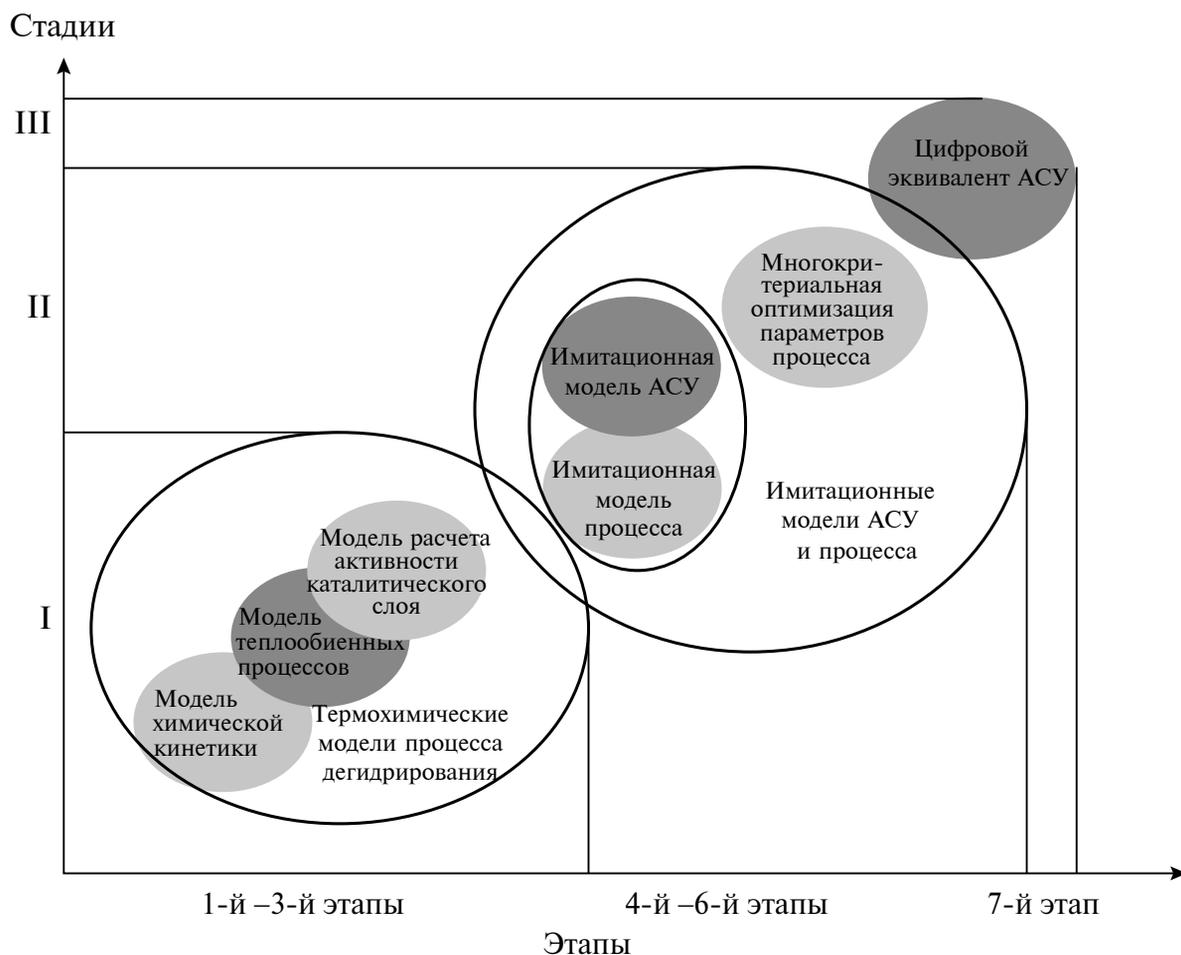


Рис. 4. Концептуальная схема синтеза цифрового эквивалента АСУ.

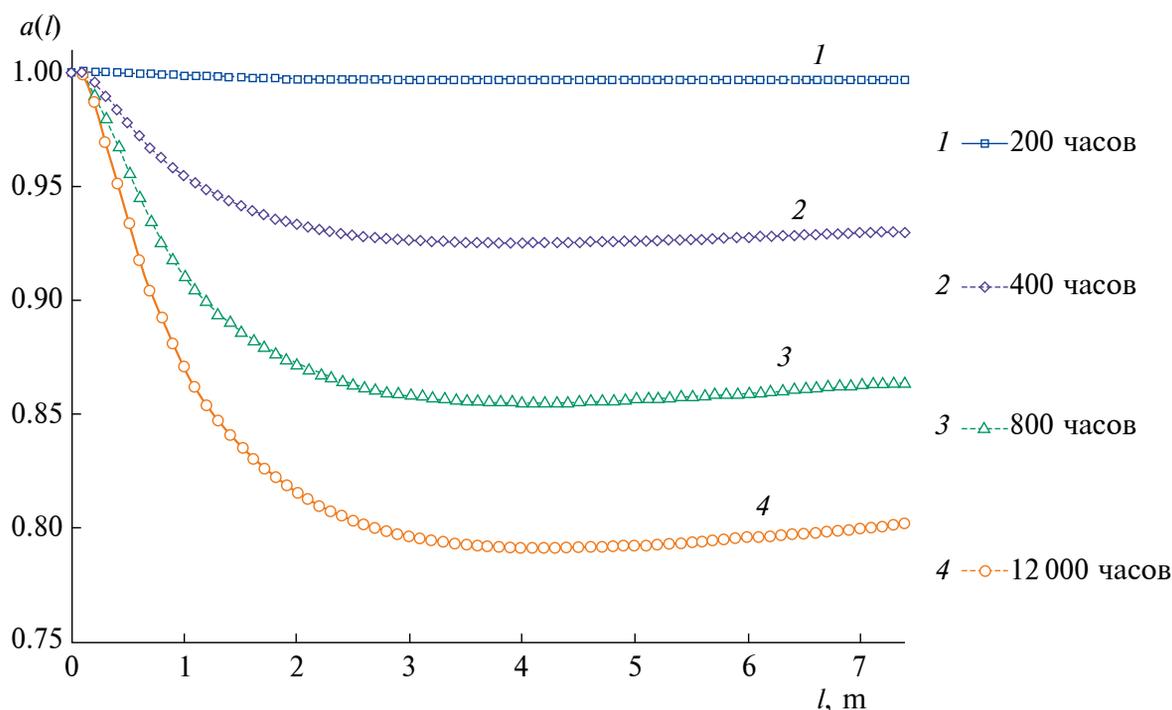


Рис. 5. Динамика изменения активности каталитического слоя по длине реакторной ступени.

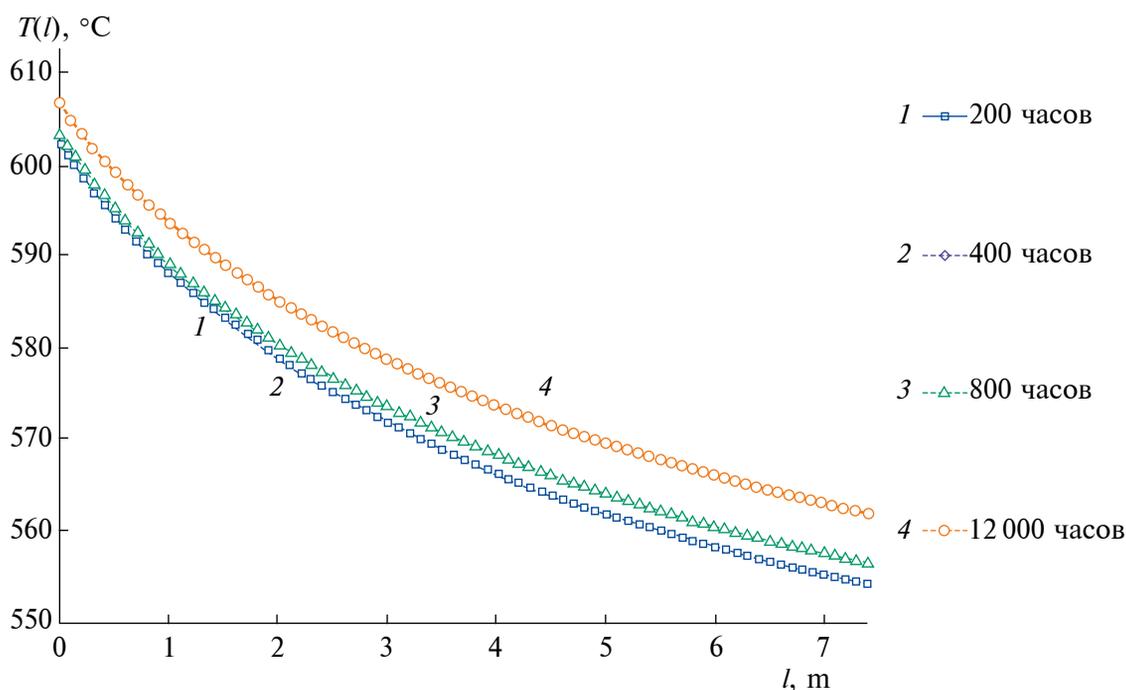


Рис. 6. Изменение температуры реакционной смеси по длине реакционной зоны.

ПИД-закона регулирования, приведены на рис. 7.

Представленные графики переходных процессов наглядно демонстрируют, что использование предиктивного управления на базе цифрового эквивалента позволяет существенно повысить оперативность выработки управля-

ющего воздействия. Что обусловлено возможностью осуществлять компенсацию влияния дезактивации катализатора в ХТС. Результаты вычислительного эксперимента показали, что использование цифрового эквивалента предиктивной АСУ обеспечивает увеличение количества целевого продукта-стирола на 3% при

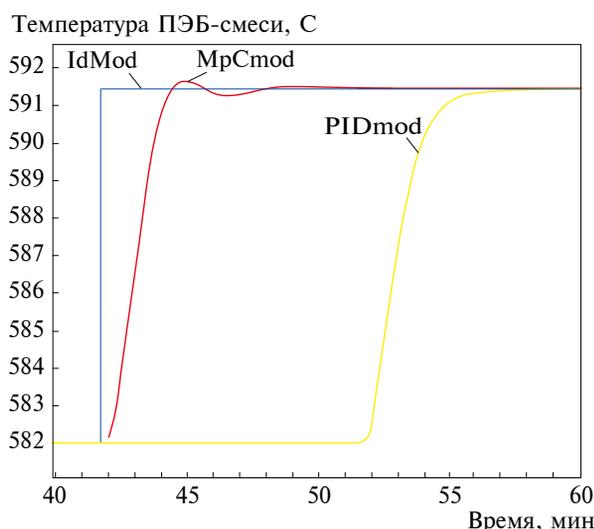


Рис. 7. Графики переходных процессов изменения температуры реакционной смеси в смесительной камере при программной эмуляции предиктивного управления.

одновременном снижении расхода водяного пара до 27%.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Анализ результатов проведенных исследований показал, что разработка имитационной модели дегидрирования этилбензола путем последовательного совершенствования математического описания кинетики позволила создать цифровой эквивалент реального процесса и его системы автоматизированного управления. Рассчитанные с помощью имитационной модели прогнозные траектории изменения физических параметров процесса, реакционной смеси и катализатора согласуются с данными промышленной эксплуатации. Графики переходных процессов АСУ, полученные при использовании предиктивного управления и управления по отклонению с использованием ПИД-закона регулирования наглядно продемонстрировали эффективность ЦЭ АСУ. Результаты модельного эксперимента показали, что использование ЦЭ АСУ обеспечивает увеличение количества целевого продукта-стирола при одновременном снижении расхода энергоносителей. Это обусловлено повышением оперативности при выработке управляющих воздействий для создания необходимого температурного режима работы ХТС с целью компенсации снижения каталитической активности. Таким образом, предложена имитационная модель для создания системы предиктивного управления дегидрированием этилбензола, которая может быть интегрирована в действующие АСУ и в режиме реального времени осуществлять выработку управляющих воздействий.

ОБОЗНАЧЕНИЯ

a, b, g, d	эмпирические коэффициенты
c	удельная теплоемкость компонентов реакционной смеси, Дж/(кг·К)
T	температура протекания процесса дегидрирования, К
T_{crit}	критическая температура, К
M	молярная масса, г/моль
m	массовый расход, т/ч
n	количество вещества компонентов реакционной смеси, моль
V	объем реакционной смеси, л
P	парциальное давление компонентов реакционной смеси, Па
P_{crit}	критическое давление, Па
P_{ig}	давление топливного газа, кгс/см ²
V_p	парциальный мольный объем компонентов реакционной смеси, л/моль
G	молярная концентрация компонентов реакционной смеси, моль/л
v	скорость потока, м/с
a	активность катализатора, [0, 1]
C^{max}	величина максимальной концентрации кокса на катализаторе, моль/л
Ea	энергия активации дегидрирования этилбензола, Дж/моль
R	универсальная газовая постоянная, Дж/(моль·К)
ΔH	тепловой эффект реакции образования стирола, Дж/кг
$k_1^0, k_2^0, k_3^0, k_4^0, k_5^0, k_6^0, k_7^0, k_8^0, k_9^0, k_{10}^0$	предэкспоненциальные множители
k_1	константа скорости образования стирола и водорода, с ⁻¹
k_c	константа равновесия
k_2	константа скорости обратной реакции, л/(моль·с)
k_3	константа скорости образования бензола и этилена, с ⁻¹
k_4	константа скорости образования толуола и метана, л/(моль·с)
k_5	константа скорости образования углерода и водорода, с ⁻¹
k_6	константа скорости образования угарного газа и водорода, л/(моль·с)
k_7	константа скорости образования метана и водяного пара, л/(моль·с)
k_8	константа разложения стирола, с ⁻¹
k_9	константа скорости реакции углерода с водяным паром, л/(моль·с)
k_{10}	константа скорости реакции этилена с водяным паром, л/(моль·с)

l	длина реакторной ступени, м
Δl	шаг по длине реакторной ступени, м
t	время протекания процесса, ч
K_{exp}	экспериментальные значения конверсии этилбензола, %
K_{ras}	значения конверсии этилбензола, полученные с помощью имитационной модели, %
S_{exp}	экспериментальные значения селективности по стиролу, %
S_{ras}	значения селективности по стиролу, полученные с помощью имитационной модели, %
w^A	скорость реакции образования стирола, моль/с
z_1	локальный критерий оптимизации по температуре водяного пара
z_2	локальный критерий оптимизации по расходу водяного пара
z_3	локальный критерий оптимизации по отклонению выхода стирола от заданного значения
m_t^{yp}	текущее значение массового расхода водяного пара, т/ч
m_{min}^{yp}	минимальное значение рабочего диапазона значений массового расхода водяного пара, т/ч
n^H	концентрация выделившегося углерода, моль/л
n_z^A	заданное значение концентрации стирола, моль/л
n_{min}^A	минимальное значение концентрации стирола, моль/л
n_{ras}^A	расчетное значение концентрации стирола на выходе из первой ступени реакторного блока, моль/л
α_i	весовой коэффициент i -го критерия
Z	обобщенный критерий оптимизации; n_z^A
IdMod	горизонт прогноза изменения величины температуры смеси на входе в реактор, полученный в результате применения имитационной модели
MPCmod	график переходного процесса системы управления, реализующей метод предиктивного управления с использованием цифрового эквивалента
PIDmod	график переходного процесса системы управления, полученный в результате применения принципа управления "по отклонению" регулируемой величины с использованием ПИД-регулятора в контуре управления

ИНДЕКСЫ

sh	этилбензольная шихта
sm	пароэтилбензольная смесь
i	номер компонента реакционной смеси
w	количество компонентов реакционной смеси
A	стирол
B	этилбензол
C	водород
D	бензол
E	этилен
F	толуол
G	метан
H	углерод
K	угарный газ
M	углекислый газ
P	водяной пар

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Романков П.Г., Рашковская Н.Б., Фролов В.Ф. Массообменные процессы химической технологии. Л.: "ХИМИЯ", 1975. С. 3.
2. Боровков А.И., Гамзикова А.А., Кукушкин К.В., Рябов Ю.А. Цифровые двойники в высокотехнологичной промышленности. Краткий доклад (сентябрь 2019 г.). СПб.: ПОЛИТЕХ-ПРЕСС, 2019.
3. Боровков А.И. Цифровые двойники в условиях четвертой промышленной революции // Connect. Мир информационных технологий. 2021. № 01–02. С. 50.
4. Gao L., Jia M., Liu D. Process Digital Twin and Its Application in Petrochemical Industry // J. Soft. Eng. Appl. 2022. V. 15. P. 308.
5. Романков П.Г., Рашковская Н.Б., Фролов В.Ф. Массообменные процессы химической технологии. Л.: "ХИМИЯ", 1975. С. 75.
6. Лебедев И.В., Иванов С.И., Сафаров Р.Р., Меньшутина Н.В. Цифровые двойники пористых структур аэрогелей с использованием клеточно-автоматного подхода и кривых Безье // Теоретические основы химической технологии. 2023. Т. 57. № 4. С. 412.
7. Шварц Д.Т. Интерактивные методы решения задачи многокритериальной оптимизации. Обзор // Наука и образование: научное издание МГТУ им. Н.Э. Баумана. 2013. № 4. С. 245–264.
8. Налетов В.А., Глебов М.Б. Методика эволюционного синтеза химико-технологических систем на основе информационного подхода // Химическая технология. 2010. Т. 11. № 4. С. 244–252.
9. Мешалкин В.П., Флисюк О.М., Марцулевиц Н.А., Гарабаджиу А.В. Теоретико-экспериментальный анализ изменения дисперсного состава частиц твердой фазы в технологических аппаратах // Доклады Российской академии наук. Химия, науки о материалах. 2021. Т. 501. № 1. С. 32–36.
10. Прохоров А., Лысачев М. Цифровой двойник. Анализ, тренды, мировой опыт. М.: ООО "Альянс-Принт", 2020. С. 69.

11. *Flisyuk O.M., Martsulevich N.A., Meshalkin V.P., Garabadzhiu A.V.* Mathematical modeling of changes in the dispersed composition of solid phase particles in technological apparatuses of periodic and continuous action // *Mathematics*. 2022. V. 10. № 6. <https://doi.org/10.3390/math10060994>
12. *Рыжова А.А., Зиятдинов Н.Н., Емельянов И.И.* Метод синтеза оптимальной одностадийной системы теплообмена с разделением потоков // *Вестник Технологического университета*. 2022. Т. 25. № 3. С. 78–82.
13. *Битюков В.К., Жатова И.А., Алексеев М.В., Попов А.П.* Разработка математической модели кинетики процесса дегидрирования этилбензола в двухступенчатом адиабатическом реакторе непрерывного действия // *Вестник Воронежского государственного университета инженерных технологий*. 2015. № 2 (64). С. 55.
14. *Попов А.П., Тихомиров С.Г., Подвальный С.Л., Неизвестный О.Г.* Динамика каталитического разложения этилбензола в производстве стирола с учетом эндотермического эффекта и величин расхода сырья // *Сб. тр. междунар. науч.-техн. форума: Современные технологии в науке и образовании – 2018*. Т. 5. Рязань, 2018. С. 79.
15. *Подвальный С.Л., Попов А.П., Тихомиров С.Г., Карманова О.В., Неизвестный О.Г., Ковалева Е.Н.* Исследование изменения состава этилбензольной шихты в реакторе производства стирола с учетом парциальных давлений реагентов // *Теоретические основы химической технологии*. 2020. Т. 54. № 6. С. 775.
16. *Шариков Ю.В., Шариков Ф.Ю.* Системы управления с использованием математических моделей технологических объектов в контуре управления *MathDesigner*. 2016. № 1. С. 4.
17. *Тихомиров С.Г., Семенов М.Е., Хаустов И.А., Битюков В.К., Хвостов А.А., Карманова О.В., Попов А.П.* Контроль и прогнозирование параметров качества полимеров в процессе их деструкции в растворе // *Теоретические основы химической технологии*. 2018. Т. 52. № 4. С. 466.
18. *Будылина Е.А., Гарькина И.А., Данилов А.М., Сухов Я.И.* Некоторые подходы к анализу и синтезу сложных систем // *Молодой ученый*. 2013. Т. 57. № 10. С. 105.
19. *Джонс Д., Маккай Б.* Модельно-ориентированное проектирование систем управления: моделирование и тестирование до реализации в аппаратуре // *Control engineering Россия*. 2013. Т. 47. № 5. С. 62.
20. *Талукдер Ю.З.* Модельно-ориентированное проектирование систем автоматического управления в инженерном образовании // *Научное обозрение. Технические науки*. 2014. № 2. С. 174.
21. *Ильин В.Н., Лепёхин А.В.* Исследование способов построения множеств равноценных альтернатив при проектировании радиоэлектронных устройств летательных аппаратов // *Труды МАИ*. 2013. № 71. С. 35.
22. *Сакулин С.А., Алфимцев А.Н.* К вопросу о практическом применении нечетких мер и интеграла Шоке // *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана*. 2012. С. 55.