

**Федеральное агентство по образованию
Государственное образовательное учреждение высшего
профессионального образования
«УФИМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ НЕФТЯНОЙ
ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Филиал УГНТУ в г. Салавате

Кафедра химико-технологических процессов

ОПТИМАЛЬНОЕ ПЛАНИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Учебно-методическое пособие к выполнению
домашнего задания по дисциплине
«Моделирование в химической технологии и расчёт реакторов»



Уфа 2009

В учебно-методическом пособии приведены теоретические основы оптимального планирования экспериментов, полного факторного эксперимента и метода оптимизации – метода крутого восхождения. Приведена методика выполнения домашнего задания. Данное пособие может быть использовано при выполнении домашнего задания студентами специальности 240403.

Составитель

Муртазин Ф.Р., доц., канд. техн. наук

Рецензенты:

Кузьминых П.В., доц., канд. физ.-мат. наук
Алексеев С.В., главный специалист отдела
технико-технологического планирования
департамента перспективного развития и
инвестиций ОАО СНОС, канд. техн. наук

1 ОПТИМАЛЬНОЕ ПЛАНИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

При проведении опытных исследований различают пассивный и активный эксперимент.

Методология *пассивного экспериментирования* предполагает проведение большой серии опытных исследований с поочередным варьированием значений входных переменных x и анализом результатов измерений выходной переменной y (*лабораторный эксперимент* и *эксперимент на пилотной установке*). К пассивному эксперименту принято относить также и сбор опытных данных в режиме эксплуатации промышленной установки — так называемый *промышленный эксперимент*.

Обработка результатов пассивного эксперимента проводится методами регрессионного и корреляционного анализа, и выбор вида эмпирической модели (уравнения регрессии), т.е. решение задачи структурной идентификации, является достаточно сложной задачей. Это связано с тем, что вид уравнения регрессии необходимо определять по характеру изменения переменных на графике эмпирической линии регрессии, полученной по выборке экспериментальных данных.

Для решения этой задачи для одной входной переменной x предложены эффективные методы, в которых предусматривается преобразование системы координат как для входной x , так и для выходной переменной y . При большем числе входных переменных x_1, \dots, x_m надёжных методов определения вида уравнения регрессии (вида эмпирической модели) в настоящее время не существует.

Активный эксперимент проводится по заранее составленному плану, в соответствии с которым ставится задача не только определения *оптимальных условий проведения эксперимента*, но и *оптимизации процесса* (эти две задачи принято относить к задачам оптимального планирования экспериментов). При этом уравнения регрессии (эмпирические модели) описывают данные активного эксперимента, в основном в двух ограниченных областях изменения переменных, характеризующих процесс, и имеют следующий вид:

■ вдали от экстремального значения выходной переменной y :

$$y = b_0 + \sum_{j=1}^k b_j x_j + \sum_{\substack{u,j=1 \\ u \neq j}}^k b_{uj} x_u x_j; \quad (1.1)$$

■ вблизи экстремального значения выходной переменной y («в почти стационарной области»):

$$y = b_0 + \sum_{j=1}^k b_j x_j + \sum_{\substack{u,j=1 \\ u \neq j}}^k b_{uj} x_u x_j + \sum_{j=1}^k b_{jj} x_j^2. \quad (1.2)$$

Приведённые уравнения являются линейными относительно коэффициентов регрессии b и имеют достаточно простой вид.

Они включают слагаемые с двойным взаимодействием входных переменных и не учитывают взаимодействия более высоких порядков (тройные, четверные и т.д.), вероятность которых существенно меньше.

Последнее уравнение включает слагаемые с квадратами входных переменных, коэффициенты его получают при обработке результатов активных экспериментов *второго порядка*.

Уравнение (1.2) не включает слагаемые с квадратами входных переменных, и его коэффициенты получают при обработке результатов активных экспериментов *первого порядка* — например, ПФЭ — *полного факторного эксперимента*.

В теории активного экспериментирования выходную (зависимую) переменную принято называть *функцией отклика*, а входные (независимые) переменные — *факторами*. Соответственно координатное пространство с координатами x_1, x_2, \dots, x_m называют *факторным пространством*, а геометрическое изображение функции отклика в факторном пространстве — *поверхностью отклика*.

Активный эксперимент планируется таким образом, чтобы упростить обработку его результатов методами регрессионного и корреляционного анализа.

2 ПОЛНЫЙ ФАКТОРНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

Метод полного факторного эксперимента (ПФЭ) служит для получения математического описания процесса в виде отрезка ряда Тейлора, содержащего линейные члены и парные взаимодействия переменных величин, и имеет вид (1.1).

Полным факторным экспериментом называется система опытов, содержащая все возможные неповторяющиеся комбинации уровней варьирования факторов.

2.1 Выбор области эксперимента

При выборе области эксперимента прежде всего надо оценить границы областей определения факторов. При этом должны учитываться ограничения нескольких типов:

- 1 принципиальные ограничения для значений факторов, которые не могут быть нарушены ни при каких обстоятельствах;
- 2 ограничения, связанные с технико-экономическими соображениями;
- 3 ограничения определяемые конкретными условиями проведения процесса.

Оптимизация обычно начинается в условиях, когда объект уже подвергался некоторым исследованиям. Эту априорную информацию можно использовать для получения представления о параметре оптимизации, о факторах, о наилучших условиях ведения процесса и характере поверхности отклика. Для этого можно использовать графики (или таблицы) однофакторных экспериментов, осуществлявшихся в предыдущих исследованиях или описанных в литературе.

В области определения надо найти локальную подобласть для планирования эксперимента. Процедура выбора этой подобласти включает два этапа: выбор основного уровня и выбор интервалов варьирования.

2.2 Выбор основного уровня

Для удобства вычислений коэффициентов регрессии все факторы в ходе полного факторного эксперимента варьируются на двух уровнях.

Допустим, определенному из анализа априорной информации наилучшему значению параметра оптимизации соответствует комбинация уровней факторов. Каждая комбинация является многомерной точкой в факторном пространстве. Её можно рассматривать как исходную точку для построения плана эксперимента. Называют её основным (нулевым) уровнем. Построение плана эксперимента сводится к выбору экспериментальных точек, симметричных относительно нулевого уровня.

2.3 Выбор интервалов варьирования

Для каждого фактора выбирают два уровня, на которых он будет варьироваться в эксперименте.

Называют один из этих уровней *верхним*, а второй — *нижним*. *Интервалом* варьирования факторов называется некоторое число, прибавление которого к основному уровню дает верхний, а вычитание — нижний уровень фактора. Другими словами, интервал варьирования — это расстояние на координатной оси между основным и верхним (или нижним) уровнем.

Для упрощения записи условий эксперимента и обработки экспериментальных данных пользуются кодированными переменными. Переход к кодированным переменным осуществляется по следующей формуле:

$$x_j = \frac{\tilde{x}_j - \tilde{x}_{j0}}{I_j}, \quad (2.1)$$

где x_j — кодированное значение фактора; \tilde{x}_j — натуральное значение фактора; \tilde{x}_{j0} — натуральное значение основного уровня; I_j — интервал варьирования; j — номер фактора.

Пусть процесс определяется четырьмя факторами. *Основной уровень* и *интервалы варьирования* выбраны следующим образом (см. таблицу 2.1).

Таблица 2.1

Фактор	\tilde{x}_1	\tilde{x}_2	\tilde{x}_3	\tilde{x}_4
Основной уровень	3	30	1,5	15
Интервал варьирования	2	10	1	10

Остановимся на первом факторе. Отметим на координатной оси три уровня: нижний, основной и верхний (см. рисунок 2.1).

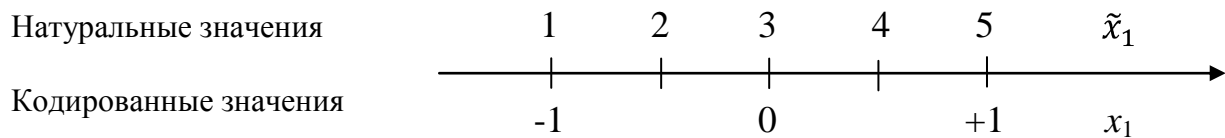


Рисунок 2.1

При решении задачи оптимизации стремятся выбрать для первой серии экспериментов такую подобласть, которая давала бы возможность для шагового движения к оптимуму. В задачах интерполяции интервал варьирования охватывает всю описываемую область.

Выбор интервалов варьирования — задача трудная, так как она связана с неформализованным этапом планирования эксперимента. На данном этапе может быть полезна следующая априорная информация — сведения о точности, с которой экспериментатор фиксирует значения факторов, о кривизне поверхности отклика и о диапазоне изменения параметра оптимизации.

2.4 Полный факторный эксперимент типа 2^k

Таблица 2.2-Матрица планирования эксперимента 2^2

Номер опыта	x_1	x_2	y
1	-1	-1	y_1
2	+1	-1	y_2
3	-1	+1	y_3
4	+1	+1	y_4

Первый этап планирования эксперимента для получения линейной модели основан на варьировании факторов на двух уровнях. Если число уровней каждого фактора равно двум, то имеем полный факторный эксперимент типа 2^k . В этом случае, если число факторов известно, можно найти число опытов: $N = 2^k$, где N - число опытов, k - число факторов, 2 — число уровней. В качестве примера в таблице 2.2 приведена матрица планирования эксперимента 2^2 (см. рисунок 2.2), а

в таблице 2.3 - матрица планирования эксперимента 2^3 .

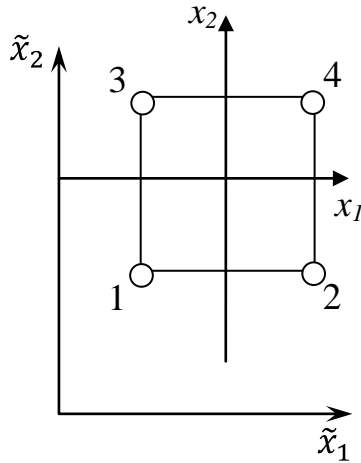


Рисунок 2.2

Таблица 2.3 - Матрица планирования эксперимента 2^3

Номер опыта	x_1	x_2	x_3	y
1	-1	-1	-1	y_1
2	+1	-1	-1	y_2
3	-1	+1	-1	y_3
4	+1	+1	-1	y_4
5	-1	-1	+1	y_5
6	+1	-1	+1	y_6
7	-1	+1	+1	y_7
8	+1	+1	+	y_8

При двухфакторном эксперименте для движения к точке оптимума нужна линейная модель $y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2$. Наша цель — найти по результатам эксперимента значения неизвестных коэффициентов модели. Оценки коэффициентов можно вычислить по простой формуле

$$b_j = \frac{\sum_{i=1}^N x_{ji}y_i}{N}, \quad j = 0, 1, \dots, k. \quad (2.2)$$

Воспользуемся этой формулой для подсчета коэффициентов b_1 и b_2 :

$$b_1 = \frac{(-1)y_1 + (+1)y_2 + (-1)y_3 + (+1)y_4}{4};$$

$$b_2 = \frac{(-1)y_1 + (-1)y_2 + (+1)y_3 + (+1)y_4}{4}.$$

Благодаря кодированию факторов расчет коэффициентов превратился в простую арифметическую процедуру. Для подсчета коэффициента b_1 используется вектор-столбец x_1 , а для b_2 — столбец x_2 . Для нахождения b_0 по формуле для вычисления коэффициентов (2.2), в матрицу планирования удобно ввести вектор-столбец фиктивной переменной x_0 которая принимает во всех опытах значение +1 (см. таблицу 2.1).

Таблица 2.4 – Матрица планирования эксперимента 2^2

Номер опыта	x_0	x_1	x_2	y
1	+1	-1	-1	y_1
2	+1	+1	-1	y_2
3	+1	-1	+1	y_3
4	+1	+1	+1	y_4

Коэффициенты при независимых переменных указывают на силу влияния факторов. Чем больше численная величина коэффициента, тем большее влияние оказывает фактор. Если коэффициент имеет знак плюс, то с увеличением значения фактора параметр оптимизации увеличивается, а если минус, то уменьшается. Величина коэффициента соответствует вкладу данного фактора в величину параметра оптимизации при переходе

фактора с нулевого уровня на верхний или нижний.

Планируя эксперимент, на первом этапе стремятся получить линейную модель. Однако нет гарантии, что в выбранных интервалах варьирования процесс описывается линейной моделью. Один из часто встречающихся

Таблица 2.5 – Матрица планирования эксперимента 2^2 с эффектом взаимодействия

Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_1x_2	y
1	+1	-1	-1	+1	y_1
2	+1	+1	-1	-1	y_2
3	+1	-1	+1	-1	y_3
4	+1	+1	+1	+1	y_4

видов нелинейности связан с тем, что эффект одного фактора зависит от уровня, на котором находится другой фактор. В этом случае говорят, что имеет место эффект взаимодействия двух факторов. Полный факторный эксперимент позволяет количественно оценивать эффекты взаимодействия (см. таблицу 2.3).

Теперь модель выглядит следующим образом:

$$y = b_0x_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2. \quad (2.3)$$

Коэффициент b_{12} вычисляется обычным путем:

$$b_{12} = \frac{(+1)y_1 + (-1)y_2 + (-1)y_3 + (+1)y_4}{4}.$$

Столбцы x_1 и x_2 задают планирование — по ним непосредственно определяются условия опытов, а столбцы x_0 и x_1x_2 служат только для расчета.

При оптимизации стремятся сделать эффекты взаимодействия возможно меньшими. В задачах интерполяции, напротив, их выявление часто важно и интересно.

С ростом числа факторов число возможных взаимодействий быстро растет. Матрица планирования 2^3 с учетом всех возможных взаимодействий приведена в таблице 2.6.

Таблица 2.6 – Полный факторный эксперимент 2^3

Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_3	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3	$x_1x_2x_3$	y
1	+1	-1	-1	-1	+1	+1	+1	-1	y_1
2	+1	+1	-1	-1	-1	-1	+1	+1	y_2
3	+1	-1	+1	-1	-1	+1	-1	+1	y_3
4	+1	+1	+1	-1	+1	-1	-1	-1	y_4
5	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	y_5
6	+1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	-1	y_6
7	+1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	-1	y_7
8	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	y_8

Столбец эффекта взаимодействия $x_1x_2x_3$ получается перемножением всех трех столбцов и называется эффектом взаимодействия *второго порядка*. Эффект взаимодействия двух факторов называется эффектом взаимодействия *первого порядка*. Вообще эффект взаимодействия максимального порядка в полном факторном эксперименте имеет порядок, на единицу меньший числа факторов. Довольно часто применяются синонимы: *парные эффекты взаимодействия* (x_1x_2), *тройные* ($x_1x_2x_3$) и т. д.

Поясним физический смысл эффекта взаимодействия следующим примером. На процесс пиролиза углеводородного сырья влияют два фактора: *температура* и *время контакта*. В области низких температур увеличение времени увеличивает выход продукта. При переходе в область высоких температур эта закономерность нарушается. Здесь, напротив, необходимо уменьшать время контакта. Это и есть проявление эффекта взаимодействия.

Ортогональность матрицы планирования позволяет получить независимые друг от друга оценки коэффициентов. Это означает, что величина любого коэффициента не зависит от того, какие величины имеют другие коэффициенты.

3 МЕТОД КРУТОГО ВОСХОЖДЕНИЯ

Выше рассмотрен метод построения экспериментально-статистических моделей в виде уравнений регрессии. Здесь рассмотрим вопрос о том, как использовать эти модели для оптимизации.

Метод крутого восхождения часто используется, если уравнение регрессии, получаемое в результате исследования, является функцией оптимизации. Метод основан на том, что *коэффициенты линейного уравнения регрессии*

$$R = R(x_1, x_2, \dots, x_k) = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \dots + b_k x_k, \quad (3.1)$$

являются координатами градиентов

$$b_1 = \frac{\partial R}{\partial x_1},$$

$$b_2 = \frac{\partial R}{\partial x_2},$$

$$\dots \dots \dots$$

$$b_k = \frac{\partial R}{\partial x_k} \quad (3.2)$$

и позволяют определить направление движения к экстремуму. Рассмотрим алгоритм метода на примере двухфакторного процесса $R = R(x_1, x_2) = \max$ (рисунок 3.1).

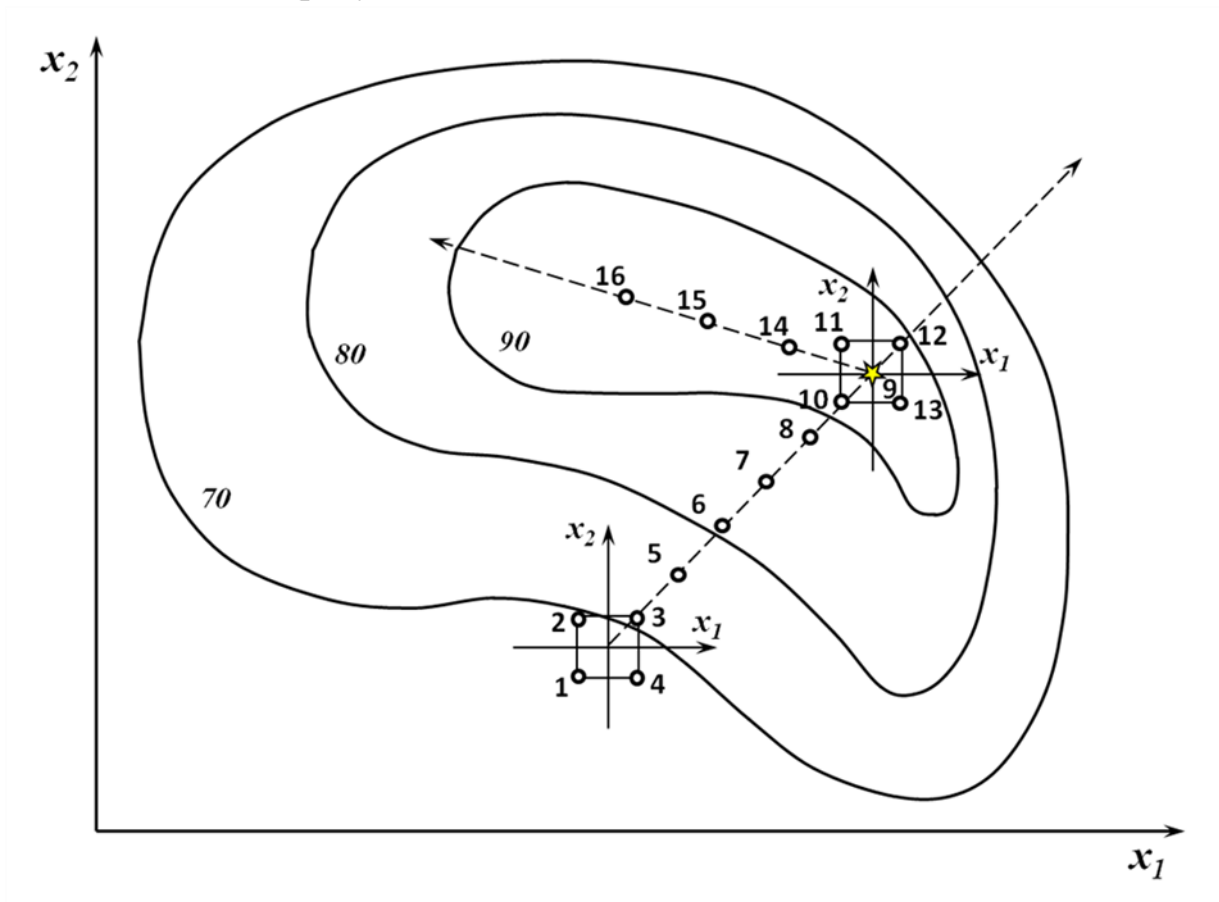


Рисунок 3.1 - Оптимизация по методу крутого восхождения

1 В произвольной точке области оптимизации разрабатывается план первого порядка по полному факторному эксперименту.

2 Рассчитываются коэффициенты уравнения регрессии (3.1) при линейных членах b_1 и b_2 по уравнению (2.2).

3 Начинается движение в плоскости, описываемой уравнением регрессии, из центра плана в сторону градиента (пунктирная стрелка на рисунке 3.1). Для этого один из влияющих факторов принимают за базовый и для него выбирают шаг движения h_1 . Для остальных факторов шаг движения к оптимальному значению h_i рассчитывают по формуле

$$h_i = \frac{h_1}{b_1 I_1} b_i. \quad (3.3)$$

После каждого шага (опыты 5-9 на рисунке 3.1) ставят контрольный эксперимент для проверки, насколько адекватно движение по градиенту фактическому поведению процесса.

4 Если на некотором шаге движения по градиенту модель оказалась уже неадекватной (в последующем опыте значение критерия оптимальности стало ниже, чем в предыдущем опыте), т. е. по ходу движения совершился переход через хребтовую линию целевой функции, то возвращаются на первый пункт алгоритма, рассматривая в качестве центра нового плана последнюю удачную точку движения по градиенту (точка 9), в ней разрабатывается новый план и продолжают 2 и 3 пункты алгоритма.

В итоге решения задачи направление градиента меняется обычно 2-3 раза, после чего происходит заикливание алгоритма — уже первый шаг из центра очередного плана становится неудачным. Это означает, что в ходе движения по градиенту мы подошли достаточно близко к экстремальной области. Тогда план первого порядка достраивается до ортогонального плана второго порядка, выполняется эксперимент по матрице планирования второго порядка, разрабатывается квадратичное уравнение регрессии и определяются координаты оптимума классическим методом с приравниванием нулю первых производных квадратичного уравнения регрессии по параметрам оптимизируемого процесса.

При наличии ограничений в области оптимизации, не позволяющих достичь точки экстремума, метод крутого восхождения обычно позволяет определить наилучшие условия ведения процесса.

4 КРАТКОЕ ОПИСАНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ОБЪЕКТА

Основным аппаратом установки процесса пиролиза является реактор (трубчатый реактор - печь пиролиза).

4.1 Описание процесса пиролиза

В реакторах пиролиза происходят различные термические превращения углеводородного сырья с получением водорода, этилена, пропилен-

на, метана, бутадиена, бутиленов, бензола, смолистых продуктов, кокса и других продуктов. Для обеспечения стабильной работы печи пиролиза необходимо поддерживать оптимальные параметры процесса, обеспечивающие требуемые выходы продуктов.

Пиролиз представляет собой сложный процесс химических реакций, делящихся на первичные и вторичные реакции. К первичным реакциям относятся реакции расщепления (крекинга) молекул парафиновых и нефтяных углеводородов с получением этилена, пропилена, метана, этана, водорода. Вторичные реакции – это в основном превращения типа конденсации и полимеризации, в результате которых из непредельных углеводородов получают диолефины, а в дальнейшем ароматические углеводороды.

Образование кокса при пиролизе является результатом вторичных реакций конденсации и полимеризации. Как в ходе первичных, так и вторичных превращений протекают реакции дегидрирования. Все превращения, протекающие при пиролизе, имеют свободно - радикальный характер, механизм превращения – цепной.

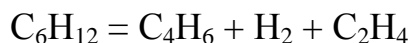
Пиролиз н-гексана:



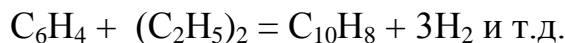
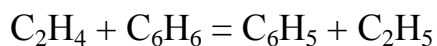
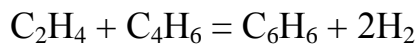
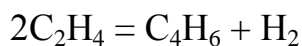
В дальнейшем полученные предельные углеводороды в свою очередь разлагаются:



Пиролиз циклогексана. Первичные реакции:



Вторичные реакции (общие для обоих исходных углеводородов):



Чем выше температура пиролиза, тем выше конверсия сырья. Если меняется состав сырья, предпочтительно поддерживать заданную температуру в реакторе, чтобы поддерживать постоянной относительную жесткость пиролиза.

Основные входные и выходные переменные реактора приведены на рисунке 4.1. Обычно на протекание процесса пиролиза воздействуют изменением расхода сырьевой смеси и температуры в реакторе. Таким образом, основными регулируемыми входными переменными реактора, влияющими на процесс пиролиза, являются Q , T .

Основные выходные переменные реактора: $Y_{ол}$ - выход суммы олефинов; $Y_э$ - выход этилена; Y_n - выход пропилена; $Y_б$ - выход суммы бутиленов.

Основными статическими характеристиками реактора являются:

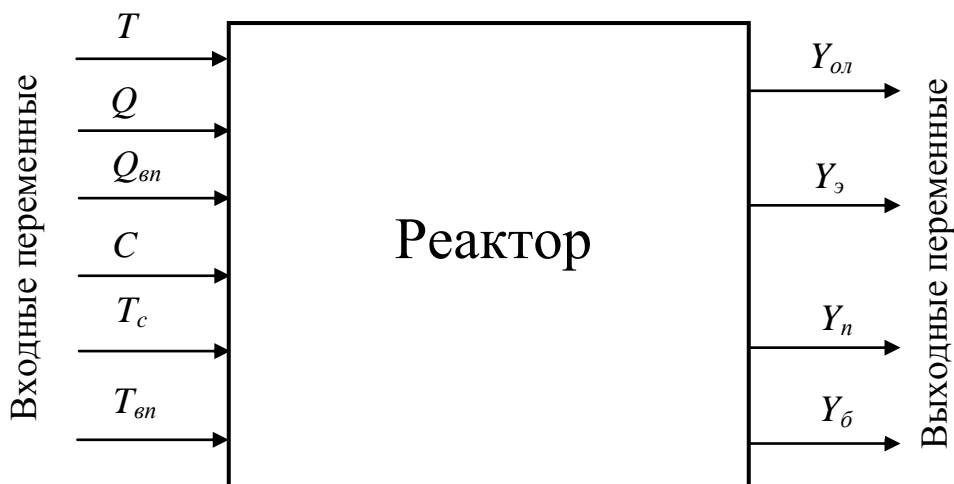
1 зависимость $Y_{ол} = f(T, Q)$;

2 зависимость $Y_э = f(T, Q)$;

3 зависимость $Y_n = f(T, Q)$;

4 зависимость $Y_б = f(T, Q)$.

Исследуемый объект (реактор) представлен в виде аналитической математической модели.



T – температура в реакторе; Q – расход сырьевой смеси; $Q_{вп}$ – расход водяного пара; C – состав сырья; T_c – температура сырья на входе в реактор; $T_{вп}$ – температура водяного пара на входе в реактор; $Y_{ол}$ – выход суммы олефинов; $Y_э$ – выход этилена; Y_n – выход пропилена; $Y_б$ – выход суммы бутиленов

Рисунок 4.1 – Схема модели реактора

4.2 Описание компьютерной модели процесса пиролиза

Математическое моделирование в последнее время становится все более эффективным методом научного исследования, основанным на познании изучаемого химико-технологического процесса с помощью математической модели. Моделирование и расчеты процессов и химических реакторов связаны с необходимостью выбора наилучшего варианта из многих возможных.

Моделирующая компьютерная программа представляет собой документ электронной таблицы Excel, с программным приложением Visual Basic и предназначена для моделирования и расчёта процесса термодеструктивного и термодеструктивного разложения углеводородов в лифтовых реакторах в температурном интервале от 450 до 800 °C. Расчёт производится совместно лифтового реактора и регенератора.

Структурная схема реакторно-регенераторного блока процесса пиролиза приведена на рисунке 4.2, где при моделировании вводятся основные входные и выводятся выходные переменные.

В математическую модель реакторного блока входят: математические модели лифтового реактора пиролиза и регенератора микросферического катализатора (контакта) в кипящем слое.

Уравнения, входящие в моделирующий алгоритм, связывают между собой материальные, тепловые, химические, гидродинамические, конструктивные и другие параметры.

Материальные и соответствующие им тепловые балансы реактора и регенератора составляют основу алгоритма расчета.

Тепловой баланс реактора:

$$\begin{aligned} Q_{кт} + Q_{прод.} + Q_{кокса} + Q_{в.п.} + Q_{тепл.реакции} + Q_{пот.} = \\ = Q_{кт}^* + Q_{ост.кокс} + Q_{сырья} + Q_{в.п.}^*; \end{aligned} \quad (4.1)$$

тепловой баланс регенератора:

$$\begin{aligned} Q_{кт}^* + Q_{ост.кокс} + Q_{дым.г} + Q_{в.п.а.} + Q_{в.п.о.} + Q_{пот.}^* + Q_{отв.} = \\ = Q_{кт} + Q_{кокса} + Q_{возд} + Q_{тепл.сг.} + Q_{в.п.а.}^* + Q_{в.п.о.}^*, \end{aligned} \quad (4.2)$$

где $Q_{кт}^*$ – количество тепла, уносимое из регенератора и вносимое в реактор катализатором; $Q_{ост.кокс}$ – количество тепла, уносимое из регенератора и вносимое в реактор коксом; $Q_{кт}$ – количество тепла, уносимое из реактора и вносимое в регенератор катализатором; $Q_{кокса}$ – количество тепла, уносимое из реактора и вносимое в регенератор коксом; $Q_{вп}^*$ – количество тепла, вносимое в реактор водяным паром; $Q_{вп}$ – количество тепла, уносимое из реактора водяным паром; $Q_{в.п.а.}$ – количество тепла, вносимое в регенератор водяным паром, адсорбированным на катализаторе; $Q_{в.п.а.}^*$ – количество тепла, уносимое из регенератора водяным паром, адсорбированным на катализаторе; $Q_{в.п.о.}$ – количество тепла, вносимое в регенератор водяным паром, подаваемым на отпарку; $Q_{в.п.о.}^*$ – количество тепла, уносимое из регенератора водяным паром, подаваемым на отпарку; $Q_{дым.г}$ – количество тепла, уносимое из регенератора дымовыми газами регенерации; $Q_{возд}$ – количество тепла, вносимое в регенератор воздухом на сжигание кокса; $Q_{пот}^*$ и $Q_{пот}$ – потери тепла в окружающую среду в регенераторе и в реакторе соответственно; $Q_{отв}$ – количество тепла, отводимое из регенератора через змеевики; $Q_{отв}$ – количество тепла, уносимого из реактора продуктами; $Q_{сырья}$ – количество тепла, которое вносится в реактор с сырьем.

Количества тепла, подводимые и отводимые из реактора и регенератора большинством материальных потоков, рассчитываются по известным классическим выражениям. Для материальных потоков, компонентный состав которых неизвестен, количества тепла рассчитывались по различным соотношениям, приведенным в литературе.

Количество тепла, уносимого из реактора продуктами $Q_{\text{прод}}$, складывается из тепла, уносимого газообразными продуктами и жидкими продуктами, находящимися в паровой фазе. Количество тепла, уносимого жидкими продуктами, находящимися в паровой фазе, определяется по уравнению

$$Q_T^n = 209,2 - 130,25 \cdot \rho_{15}^{15} + (0,543 - 0,134 \cdot \rho_{15}^{15}) \cdot T + (0,00234 - 0,00059 \cdot \rho_{15}^{15}) \cdot T^2 \quad (4.3)$$

Тепловой эффект реакций пиролиза определяется по формуле

$$\Delta H = (300 \cdot (1 + x) + 1500 \cdot x^2) \cdot 1000, \quad (4.4)$$

где x – степень превращения сырья.

Температура в реакторе определяется температурой в зоне смешения сырья с катализатором и температурой продуктов и катализатора на выходе из реактора следующим уравнением:

$$T_p = \frac{T_{\text{вых}} + T_x}{2}. \quad (4.5)$$

Температура в зоне смешения катализатора с сырьем определяется из теплового баланса в зоне смешения методом итерационного приближения:

$$n \cdot C_{\text{кт}} \cdot T_{\text{вх}} + \Delta H_{\text{сырья}} = n \cdot C_{\text{кт}} \cdot T_x + \Delta H_x, \quad (4.6)$$

где n – кратность циркуляции катализатора; T_x – искомая температура, К; $\Delta H_{\text{сырья}}$ – теплосодержание сырья при соответствующей ему температуре, с которой оно подается в реактор; ΔH_x – теплосодержание сырья в паровой фазе после установления температуры смешения T_x .

Температуры на выходе из реактора и температура в регенераторе находятся из тепловых балансов реактора и регенератора с использованием итерационного метода, т.е. постепенного приближения к искомому решению.

Температура на выходе из реактора определяется по уравнению

$$T_{\text{вых}} = \frac{Q_{\text{кт}}^* + Q_{\text{кост.окс}} + Q_{\text{сырья}} + Q_{\text{в.п.}}^* - Q_{\text{тепл.реакции}} - Q_{\text{пот.}}}{G_{\text{кт}} \cdot C_{\text{кт}} + G_{\text{кокс}} \cdot C_{\text{кокс}} + G_{\text{прод.}} \cdot \Delta H_{\text{прод.}} + G_{\text{в.п.}} \cdot C_{\text{в.п.}}}, \quad (4.7)$$

где $G_{\text{кт}}$, $G_{\text{кокс}}$, $G_{\text{прод.}}$, $G_{\text{в.п.}}$ – соответственно количества катализатора, кокса, продуктов реакций пиролиза, водяного пара; C_i – их теплоемкости; $\Delta H_{\text{прод.}}$ – теплосодержание продуктов при искомой температуре $T_{\text{вых}}$.

Температуру в регенераторе определяем по уравнению

$$T_p^* = \frac{Q_{кт} + Q_{кокса} + Q_{возд.} + Q_{тепл.сг.} + Q_{в.п.а.}^* + Q_{в.п.о.}^* - Q_{отв} - Q_{пот.}^*}{G_{кт} \cdot C_{кт} + G_{ост.кокс} \cdot C_{ост.кокс} + G_{дым.г.} \cdot C_{дым.г.} + (G_{в.п.а.} + G_{в.п.о.}) \cdot C_{в.п.}}, \quad (4.8)$$

К основным входным переменным математической модели относятся температура и скорость подачи сырья, кратность циркуляции катализатора, расход и температура водяного пара, подаваемого в зону смешения, температура и расход воздуха, подаваемого в регенератор для выжиг кокса.

Основными выходными переменными являются температура в аппаратах, глубина превращения сырья, состав получаемых продуктов, остаточный кокс на катализаторе и концентрация газов в продуктах горения.

Кинетические закономерности процессов пиролиза, выжиг кокса описываются математической моделью разработанной на основе экспериментальных и литературных данных.

Вероятностно-статистическая кинетическая модель процессов пиролиза, по которой определяются составы получаемых продуктов на выходе из реактора, в общем виде представляет собой зависимости выхода продуктов пиролиза от параметров нормальной функции распределения:

$$C_i = f(C_m, \sigma^2, F_{cp1}, F_{cp2}), \quad (4.9)$$

где C_m – максимально возможный выход i -го компонента, F_{cp1} и F_{cp2} – средние значения фактора жесткости кривых образования или разложения; σ^2 – дисперсия фактора жесткости F .

Величина степени выжиг кокса в регенераторе определяется по формуле

$$y = 1 - \left[1 + k_2 \frac{2k_1 C_o t}{3 + k_2^2} \right]^{1/2}, \quad (4.10)$$

где C_o – начальная концентрация кислорода; k_1 и k_2 – параметры, зависящие от температуры и радиуса зерен катализатора.

Математическая модель регенератора по твердой фазе как проточно-го реактора идеального смешения имеет вид

$$Y = 1 - \int_0^{t_k} 1 - y \frac{\exp(-t/t_n)}{t_n} dt, \quad (4.11)$$

где Y – средняя степень выжиг кокса; y – степень выжиг кокса на отдельном зерне; t_k – время, необходимое для полного выжиг кокса с поверхности катализатора; t – текущее время; $t_n = M_k / G_k$ – среднее время пребывания катализатора в регенераторе; M_k – масса катализатора в регенераторе; G_k – массовый расход подачи катализатора в регенератор.

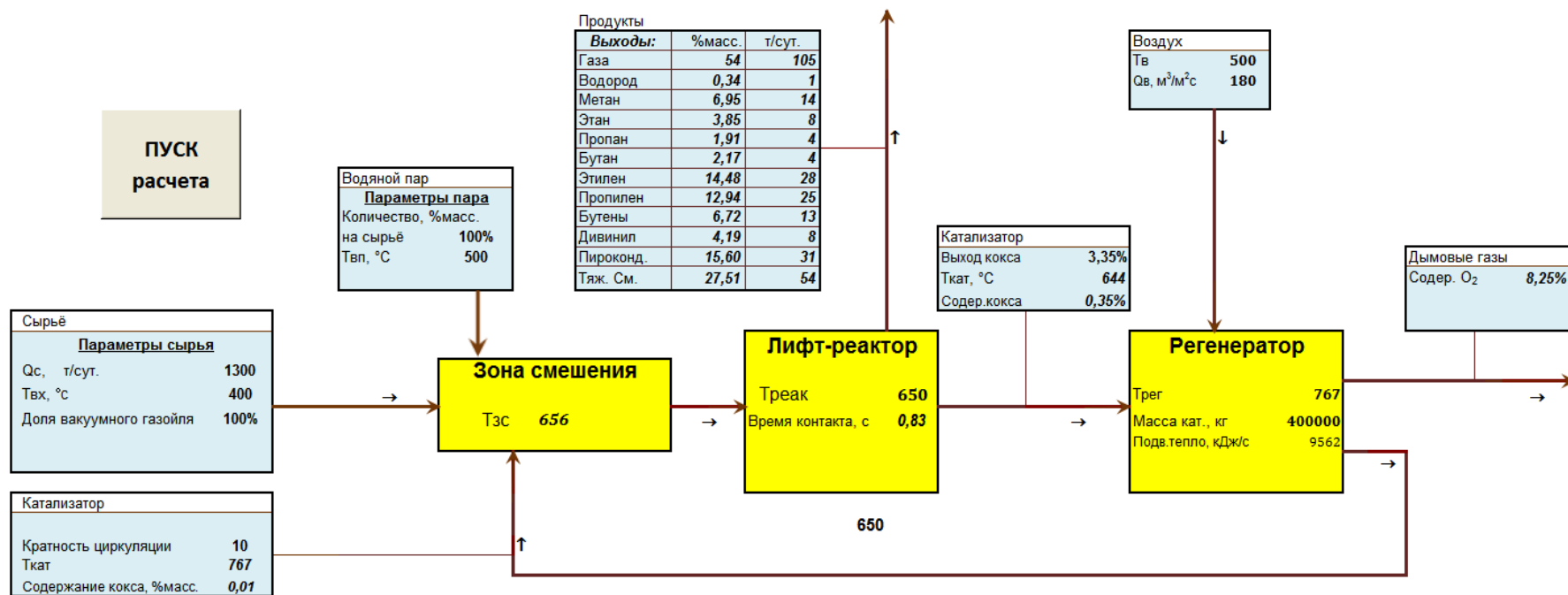


Рисунок 4.2 – Структурная схема реакторно-регенераторного блока процесса пиролиза

Моделирующий алгоритм реализован следующим образом. В связи с тем, что технологические параметры работы реактора и регенератора взаимосвязаны, расчет реакторно-регенераторного блока носит итерационный характер. После ввода входных переменных задаются приближенным значением температуры катализатора на выходе из лифт-реактора (или в регенераторе) и содержанием кокса на катализаторе. Затем производится расчет регенератора. Суть расчета регенератора заключается в определении температуры в регенераторе, остаточного кокса на катализаторе и концентрации газов в продуктах горения. Зная температуру катализатора, поступающего в реактор, определяются температура в зоне смешения, температура продуктов на выходе из реактора, средняя температура в зоне реакции. В ходе расчетов определяются все составляющие материального и теплового балансов аппаратов и все выходные переменные. Выходы продуктов пиролиза при этом рассчитываются по вероятностно-статистической кинетической модели.

Вычисленная в результате расчетов температура катализатора на выходе из лифт-реактора сравнивается с исходным её значением и, если разница их превышает заранее заданную величину, принятую за критерий решённости, расчет повторяется при новом значении температуры.

5 ПОРЯДОК ВЫПОЛНЕНИЯ РАБОТЫ

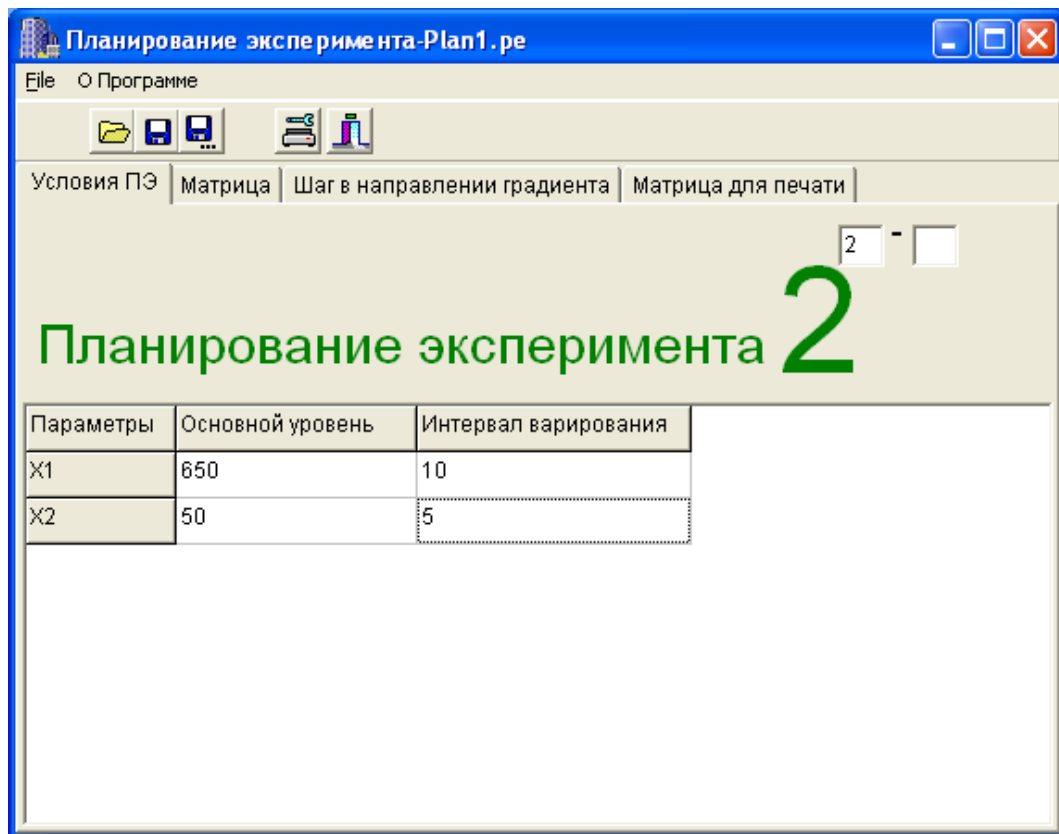
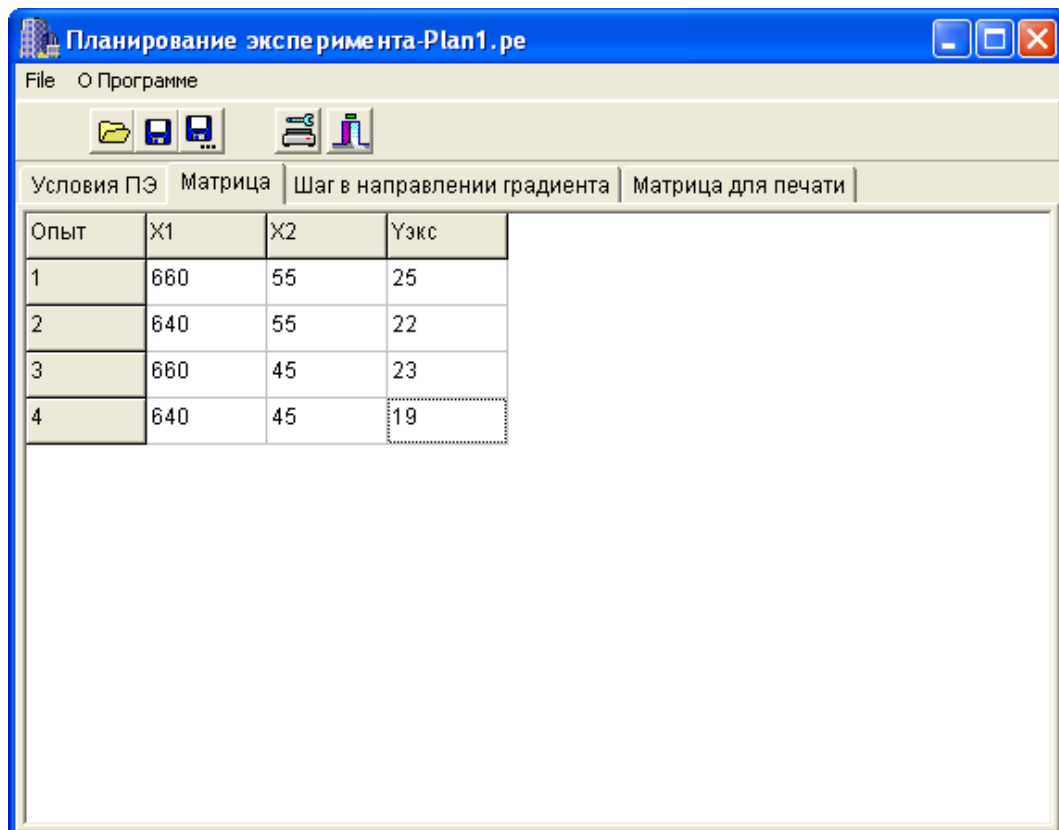
1) Выбор параметра оптимизации, факторов, области определения факторов и основного уровня факторов (согласно варианту задания по приложению).

2) Выбор интервалов варьирования факторов.

3) Выбор плана (составить матрицу планирования опытов). Для этого можно пользоваться программой **ПЛАН.exe**. После запуска программы в окне, показанном на рисунке 5.1, вводите координаты основного уровня и интервалы варьирования факторов полнофакторного эксперимента 2^2 .

4) В окне, приведенном на рисунке 5.2, программой составляется матрица планирования эксперимента в натуральных значениях факторов, т.е. условия проведения опытов.

5) Используя моделирующую программу **Lift-Reactor.xlm** согласно матрице планирования провести первую серию компьютерных опытов. После запуска программы **Lift-Reactor.xlm** на мониторе появится окно, приведенное на рисунке 4.2. Основные технологические параметры установлены по умолчанию. Необходимо ввести значения температуры в реакторе и количество водяного пара. После нажатия на кнопку **ПУСК** производится итерационный расчёт реакторно-регенераторного блока. Занести результаты опытов $Y_{\text{экс}}$ в таблицу окна **Матрица**.

Рисунок 5.1– Окно **Условия ПЭ**Рисунок 5.2 – Окно **Матрица**

6) Перейти в окно **Шаг в направлении градиента**, ввести приращение одного из факторов (см. рисунок 5.3). При этом значение другого фактора вычисляется автоматически. Шаг должен быть меньше или равен интервалу варьирования. Если направление выбрано правильно, в окне появляется надпись **Шаг осуществляется в направлении максимума**. В противном случае необходимо вводить отрицательное значение приращения фактора. Записывайте уравнение линейной модели. Во втором столбце вычисляются значения координаты очередного основного уровня. При этих значениях проводится опыт на моделирующей программе **Lift-Reactor.xlm**.

7) После каждого опыта проверяется адекватность движения по градиенту фактическому поведению процесса. Легче всего это сделать, сравнивая значение оптимальности в последующем опыте со значением критерия в предыдущем опыте: если оно стало, ниже, то разрабатывается новый план, с использованием координат предыдущего опыта в качестве основного уровня. Находится новое математическое описание и т.д.

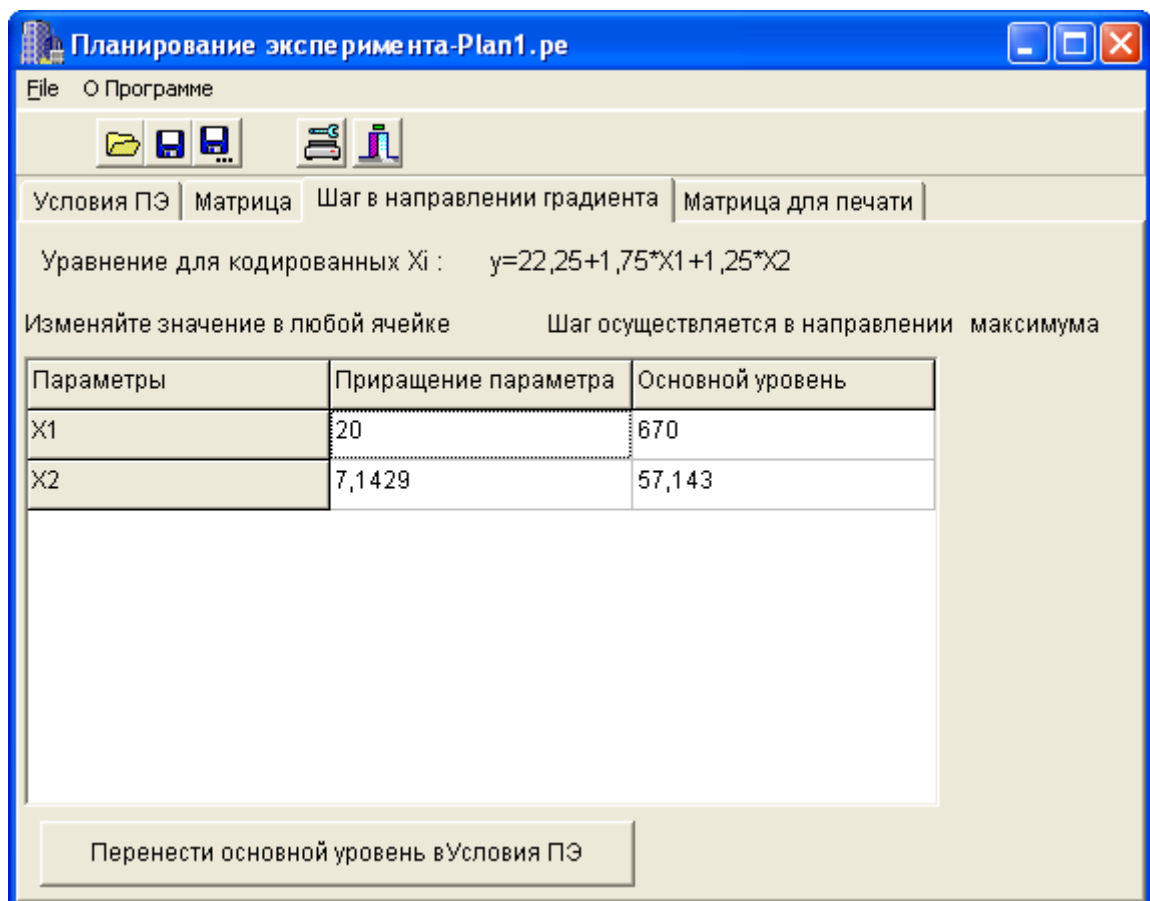


Рисунок 5.3 – Шаг в направлении градиента

8) Используя **EXCEL**, дать геометрическую интерпретацию процесса нахождения оптимума параметра оптимизации.

9) Сделать выводы о проделанной работе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1 Гартман Т.Н. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов: учеб. пособие для вузов / Т.Н. Гартман, Д.В. Клушин. – М.: ИЦК «Академкнига», 2006. –416 с.
- 2 Самойлов Н.А. Моделирование в химической технологии и расчёт реакторов: учеб. пособие. –Уфа: ООО «Монография», 2005. – 224 с.
- 3 Виноградов В.М., Колесников И.М., Винокуров В.А., Любименко В.А. Моделирование в химии: учеб. пособие (Сер. «Химическая кибернетика»). – М.: ФГУП Изд-во «Нефть и газ» РГУ нефти и газа им. И.М. Губкина, 2003. – 161 с.
- 4 Кафаров В.В., Глебов М.Б. Математическое моделирование основных процессов химических производств. –М.: Высш. шк., 1991. – 400 с.
- 5 Кафаров В.В., Ветохин В.Н., Бояринов А.И. Программирование и вычислительные методы в химии и химической технологии. – М.: Наука, 1972. – 486 с.
- 6 Кафаров В.В. Методы кибернетики в химии и химической технологии. – М.: Химия, 1976. –463 с.
- 7 Персональный компьютер для всех: в 4-х кн. -Кн. 4. Вычислительные и графические возможности: практ. пособие/ А.Я.Савельев, Б.А.Сазонов, С.Э. Лукьянов; под ред. А.Я.Савельева. –М.: Высш. шк., 1991. –207 с.
- 8 Жоров Ю.М. Моделирование физико-химических процессов нефтепереработки и нефтехимии. –М.,Химия, 1978. – 376 с.
- 9 Жоров Ю.М. Кинетика промышленных органических реакций: справочник. –М.: 1989. –384 с.
- 10 Безденежных А.А. Инженерные методы составления уравнений скоростей реакций и расчета кинетических констант. –Л.: Химия, 1973. –256 с.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Варианты к выполнению домашнего задания

Номер варианта	Доля ва- куумного газойля в сырье, %масс.	Основной уровень		Параметр оптимизации
		x_1	x_2	
		Температура в реакторе $T_p, ^\circ\text{C}$	Расход водяного пара, %масс. на сырьё	Выход продукта, т/сут
1	5	650	10	Этилен
2	10	650	100	Пропилен
3	15	650	100	Суммы олефинов
4	20	650	10	Этилен
5	25	650	100	Пропилен
6	30	650	100	Суммы олефинов
7	35	650	10	Этилен
8	40	650	100	Пропилен
9	45	650	100	Суммы олефинов
10	50	650	10	Этилен
11	55	650	100	Пропилен
12	60	650	100	Суммы олефинов
13	65	650	10	Этилен
14	70	650	100	Пропилен
15	75	650	100	Суммы олефинов
16	80	650	10	Этилен
17	85	650	100	Пропилен
18	90	650	100	Суммы олефинов
19	95	650	10	Этилен
20	100	650	100	Пропилен
21	93	650	100	Суммы олефинов
22	83	650	10	Этилен
23	43	650	100	Пропилен
24	33	650	100	Суммы олефинов
25	23	650	10	Этилен
26	13	650	100	Пропилен
27	87	650	100	Суммы олефинов
28	77	650	10	Этилен
29	67	650	100	Пропилен
30	57	650	100	Суммы олефинов

СОДЕРЖАНИЕ

1	ОПТИМАЛЬНОЕ ПЛАНИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТОВ	1
2	ПОЛНЫЙ ФАКТОРНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ	2
2.1	Выбор области эксперимента	2
2.2	Выбор основного уровня.....	3
2.3	Выбор интервалов варьирования	3
2.4	Полный факторный эксперимент типа 2^k	4
3	МЕТОД КРУТОГО ВОСХОЖДЕНИЯ	7
4	КРАТКОЕ ОПИСАНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ОБЪЕКТА	9
4.1	Описание процесса пиролиза.....	9
4.2	Описание компьютерной модели процесса пиролиза.....	12
5	ПОРЯДОК ВЫПОЛНЕНИЯ РАБОТЫ	17
	СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.....	20
	ПРИЛОЖЕНИЕ А	
	Варианты к выполнению домашнего задания	21

Редактор Л.А. Маркешина

Подписано в печать 03.07.09. Бумага офсетная. Формат бумаги 60x84 1/16.

Гарнитура "Таймс". Печать трафаретная. Усл. печ. л. 1,5. Уч.-изд л. 1,3.

Тираж 100 экз. Заказ .

Издательство Уфимского государственного нефтяного технического университета

Адрес издательства:

450062, Республика Башкортостан, г.Уфа, ул. Космонавтов, 1