

ИНФОРМАЦИОННАЯ ДЕКОМПОЗИЦИЯ И МОДЕЛИРОВАНИЕ МНОГОСТАДИЙНЫХ ПРОЦЕССОВ С ОБРАТИМЫМИ РЕАКЦИЯМИ НА ОСНОВЕ ОБОБЩЕННЫХ ПАРАМЕТРОВ (НА ПРИМЕРЕ СИНТЕЗА ДИХЛОПРОПАНОЛОВ)

В.В. Авхадеев (ЗАО "Каустик"),
 А.П. Веревкин (Уфимский государственный нефтяной технический университет),
 Ф.Ф. Зайнетдинов, В.И. Маталинов (ЗАО "Каустик")

Рассматривается анализ закономерностей и технологических особенностей многостадийных химических процессов с обратимыми реакциями. Предложен принцип информационной декомпозиции и методология создания моделей процессов с высокой степенью взаимного межстадийного влияния внутренних переменных на основе обобщенных параметров на примере синтеза раствора дихлорпропанолов.

В современных условиях для обеспечения конкурентоспособности производимой продукции требуется снижение затрат на производство при обеспечении потребительских свойств продукции, удовлетворяющих требованиям рынка. Одним из главных направлений работ в этой области является прямое управление процессами производства по показателям качества продукции и ТЭП, включая решение оптимизационных задач управления.

Анализ закономерностей и технологических особенностей ряда процессов синтеза и ректификации хлорорганических соединений позволил установить, что для большинства ТП вследствие высокой степени обратимости ряда химических реакций, неизбежным является образование в реакционной массе побочных хлорорганических продуктов. Данная закономерность, а также погрешности измерения параметров, неоптимальное ведение технологического режима обуславливают технологические потери и повышают производственную себестоимость конечных целевых хлорорганических продуктов. Существенным является также ухудшение экологических показателей производства [1].

В смысле ТЭП целью оптимизации управления ТП является получение максимального количества конечных целевых хлорорганических продуктов синтеза и снижение числа побочных компонентов в реакционной массе при ограничениях, связанных с возможностями технологических аппаратов и ресурсов.

Трудности реализации задач управления и оптимизации обусловлены многостадийностью процессов химической технологии, высокой степенью взаимного влияния переменных, характеризующих процессы как между стадиями, так и внутри каждой стадии высокой степенью обратимости большинства протекающих реакций, невозможностью непосредственного измерения (либо измерения с достаточной точностью) параметров качества и констант химических реакций, а также наличием динамики процессов [3].

В связи с этим, предлагается из числа доступных для непосредственного измерения параметров, в первую очередь, организовать отдельные информационные блоки, каждый из которых с учетом теоретических знаний и закономерностей процессов позволяет описать отдельные стадии ТП через интегральные (обобщенные) параметры, в число которых могут входить показатели качества. Во-вторых, декомпозировать описание ТП через полученные информационные блоки, которые будут взаимодействовать на уровне интегральных параметров. Этот подход назовем информационной декомпозицией химико-технологического процесса.

ТП синтеза раствора дихлорпропанолов (ДХП) хлоргидроксилированием хлористого аллила предназначен для получения заданных количеств целевых дихлорпропанолов из щелочи, абгазного хлора, воды и хлористого аллила.

Синтез раствора дихлорпропанолов осуществляется в две химические стадии [2]:

- получение хлорноватистой кислоты с концентрацией не более 30 г/л из щелочи, воды и абгазного хлора;

- получение раствора ДХП взаимодействием хлорноватистой кислоты с хлористым аллилом (хлоргидроксилирование хлористого аллила). Помимо основного продукта реакции — раствора ДХП, в реакторе образуются побочные продукты: трихлорпропан и хлорэфиры. Образование этих побочных продуктов становится неизбежным как за счет реакций хлорирования ДХП растворенным хлором, так и за счет взаимодействия побочных хлорэфиров с исходным хлористым аллилом [2].

На начальном этапе наиболее важной задачей процесса управления является поддержание концентрации хлорноватистой кислоты в регламентных рамках. Измерить данный параметр непосредственно не представляется возможным вследствие нестабильности и высокой степени химической (коррозионной) активности хлорноватистой кислоты. На этапе хлоргидроксилирования аналогичным параметром является показатель степени конверсии хлора. Измерить эту величину также невозможно вследствие высокой степени взаимного межстадийного влияния внутренних переменных на нее. Оценка именно этих параметров при моделировании процессов является одной из основных целей исследования.

При формировании интегральных переменных будем исходить из необходимости разработки такой избыточной модели, кото-

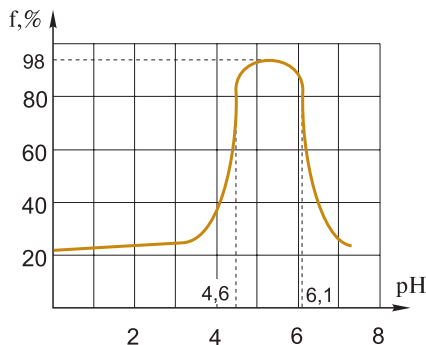


График зависимости концентрации f от величины pH

рая будет инвариантна к параметрам процесса, определяющим физико-химический баланс всей системы, а также обладать широкими возможностями оперативной идентификации и адаптации к действующему процессу.

Для реализации идеи информационной декомпозиции и более наглядной идентификации физико-химических механизмов и закономерностей данного технологического процесса синтеза выделим ряд обобщенных внутренних переменных.

На этапе получения хлорноватистой кислоты: S – сумма молярных концентраций различных форм активного хлора; f – концентрация хлорноватистой кислоты; h – активность ионов водорода; v – степень "нейтрализованности" хлористого водорода, образованного при получении раствора хлорноватистой кислоты; $K1$ и $K2$ – коэффициенты равновесия реакций на этапе получения хлорноватистой кислоты.

На этапе синтеза ДХП: a – концентрация дихлорпропанолов; w – концентрация побочных хлорэфиров; g – показатель степени конверсии хлора в реакторе; e – концентрация трихлорпропана (побочный продукт); j – показатель степени конверсии хлора на побочные продукты, в частности, трихлорпропана; $K0$ – коэффициент равновесия уравнения диссоциации воды.

Следует иметь в виду, что:

$$\gamma = \frac{\alpha + 2\omega_j}{S}; \quad \varphi = \frac{\varepsilon_j}{S}. \quad (1)$$

Уравнение электронейтральности системы на этапе получе-

ния хлорноватистой кислоты [3] имеет вид:

$$\begin{cases} \frac{K1 \times S}{K1 + f \times h} + \frac{K2 \times f}{h} + \frac{K0}{h} = S \times v + h; \\ \frac{f \times h \times S}{K1 + f \times h} + f + \frac{K2 \times f}{h} = S; \end{cases} \quad (2);$$

$$f = \frac{K1}{2h} \times \left(\sqrt{1 + \frac{4 \times S \times h^2}{K1 \times (K2 + h)}} - 1 \right); \quad (3)$$

$$v = \frac{\left\{ \frac{K1 \times h \times S + (K1 + f \times h) \times}{\times (K2 \times f + K0 - h^2)} \right\}}{h \times S \times (K1 + f \times h)}. \quad (4)$$

Примем: $j = K3 \times g$; и $w = K4 \times g$. Коэффициенты $K3$ и $K4$ берутся исходя из лабораторных анализов конечной реакционной массы процесса синтеза.

Используя введенные обозначения, сформулируем уравнение электронейтральности системы [3] на конечном этапе синтеза ДХП, приведенное к величине конверсии хлора g :

$$\gamma = \frac{1}{K3 + K4} - \left((v \times S + h) - \frac{K0 + K2 \times f}{h} \right) \times \frac{K1 + f \times h}{K1 \times S \times (K3 + K4)}. \quad (5)$$

По лабораторным данным, максимальная концентрация хлорноватистой кислоты достигается при величине $pH = 4,6 \dots 6,1$ (рисунок). Необходимо отметить, что существует такая величина (H^+) в растворе, при которой концентрация ($HClO$) является максимальной.

Информационная декомпозиция ряда внутренних переменных процесса позволила рассчитать показатель нейтрализованности системы v , который удобнее для оценки и управления величиной концентрации, нежели показатель pH раствора. При вхождении системы в зону оптимума, т. е. максимального значения концентрации, (рисунок) показатель v лежит в пределах $1 \pm 0,22$.

Используя результаты информационной декомпозиции, а также основные уравнения данной модели, становится возможным сформулировать основные критерии и задачи оптимизации ТП.

Главной задачей оптимизации ТП на этапе получения хлорнова-

тистой кислоты является поиск оптимального значения pH раствора, при котором:

$$\Psi_{(i)} = \frac{f_{(i)}}{S} \rightarrow \max; \quad v_{(i)} \in \cup(1), \quad (6)$$

где i – признаки вхождения системы в зону оптимума на этапе получения хлорноватистой кислоты.

Главной задачей оптимизации ТП на этапе получения синтеза ДХП является поиск оптимального значения pH раствора, при котором:

$$\begin{aligned} \gamma_j &= \frac{\alpha_j + 2\omega_j}{S} \rightarrow \max; \\ \varphi_j &= \frac{\varepsilon_j}{S} \rightarrow \min, \end{aligned} \quad (7)$$

где j – признаки вхождения системы в зону оптимума на завершающем этапе.

Для нахождения экстремума функции $f(S, h)$ (3) продифференцируем ее по величине pH и приравняем к нулю:

$$\begin{aligned} & \frac{K1 \times 10^{ph} \times \ln 10}{2} \times \\ & \times \left(\sqrt{1 + \frac{4 \times S \times (10^{-ph})^2}{K1 \times (K2 + 10^{-ph})}} - 1 \right) + \\ & + \frac{K1 \times 10^{ph}}{2} \times \\ & \times \left(\frac{1}{2 \times \sqrt{1 + \frac{4 \times S \times (10^{-ph})^2}{K1 \times (K2 + 10^{-ph})}}} \right) \times \\ & \times \left\{ \frac{4 \times S \times K1 \times \ln 10 \times}{\times (10^{-ph} - 2 \times (K2 + 10^{-ph}))} \right\} \\ & \times \frac{10^{2ph} \times (K1 \times (K2 + 10^{-ph}))^2}{10^{2ph} \times (K1 \times (K2 + 10^{-ph}))^2} = 0. \quad (8) \end{aligned}$$

Решив данное уравнение методом половинного деления, получим оптимальные значения pH для каждого S .

Проверка эффективности информационной декомпозиции и адекватности полученной модели проводилась на основе оценки погрешности вычисления ряда внутренних переменных процесса. Сопоставление результатов расчетов и параметров, полученных лабораторным путем, показало, что параметр f вычисляется с погрешностью 2,1%, показатель степени конверсии хлора g – с погрешностью 3,2%. Очевидно, что для целей

оперативного управления данная модель может рассматриваться как вполне адекватная действующему процессу, а решение систем уравнений (4) и (5) позволяет повысить точность прогнозирования и эффективность управления.

Использование данной математической модели в составе действующей АСУТП позволило стабилизировать ряд "критических" параметров, в частности, величину концентрации хлорноватистой кислоты, показатель степени конверсии хлора, показатель степени нейтра-

лизованности хлористого водорода, образованного при получении раствора хлорноватистой кислоты, общее число побочных хлорорганических продуктов в реакционной массе. Решение задач оптимизации, сформулированных уравнениями (6) и (7) приведет к увеличению выхода целевых ДХПов, повышению их качества, снижению производственных потерь хлористого алила, а также существенно сокращению выброса органической фазы в сточные воды.

Авахдеев В.В. — ведущий инженер по автоматизации, Маталинов В.И. — зам. начальника производства №3, Зайнетдинов Ф.Ф. — главный метролог ЗАО "Каустик",

Вережкин А.П. — д-р техн. наук, проф., зав. кафедрой АХТП УГНТУ,

Горин В.Н. — канд. техн. наук, ген. директор, Лернер А.С. — канд. техн. наук, зам. директора ООО "САНАК-1",

E-mail: elasutp@ok.ru, ahtp@intra.rusoil.net

ВЕСТЬ[®] КОНСАЛТИНГОВАЯ ГРУППА

В конце декабря 2003 г. компания Весть заключила эксклюзивное партнерское соглашение в области систем промышленной автоматизации с мировым лидером ЕАМ-систем компанией Datastream на локализацию и продвижение на российском рынке системы управления основными фондами с одноименным названием.

Компания Весть, последовательно следуя идеологии выполнения вертикальных проектов автоматизации производственных предприятий, дополнила свой спектр решений по промышленной автоматизации услугами по внедрению и адаптации системы Datastream класса ЕАМ (Enterprise Asset Management) — управление основными фондами.

Управление основными фондами тесно связано с техническим обслуживанием и ремонтами (ТОиР) — одной из крайне важных областей деятельности предприятий таких отраслей, как энергетика, транспорт, оборонная, добывающая, телекоммуникации, автосервис.

Система Datastream предназначена для комплексной автоматизации процессов управления материальными активами, связанных с ними процессов технического обслуживания и модернизации оборудования. Она интегрируется с АСУТП, позволяя

"Весть" будет продвигать Datastream — решение в области управления основными фондами

получать от них данные, на основе которых проводится анализ необходимости выполнения тех или иных ремонтных/профилактических работ, управляет всем жизненным циклом оборудования, начиная с проектирования, изготовления, монтажа, сборки и последующего обслуживания, сервисных и профилактических работ, модернизации, реконструкции и списания. Таким образом, в рамках этого жизненного цикла система обеспечивает поддержку всех бизнес-процессов.

Для российского рынка с учетом специфики состояния отечественных производственных фондов (старое, изношенное оборудование) степень востребованности таких систем крайне высока. Случаи планирования и регулярного управления затратами на ремонт и техническое обслуживание станков и оборудования — довольно редкое явление. Лишь отдельные предприятия предпринимают попытки оптимизировать свои расходы, повысить коэффициент эффективного использования оборудования, ввести практику ремонтов по состоянию. В то же время, именно своевременный учет всех этих факторов и использование соответствующих информационных технологий позволяют предприятию существенно экономить свои расходы на поддержание работы производства.

Список литературы

1. *Авахдеев В.В., Вережкин А.П.* Управление процессом синтеза раствора дихлоргидринов глицерина по показателям качества // Материалы научн.-практич. конференции "Промышленная экология. Проблемы и перспективы". Уфа. 2001.
2. *Якименко Л. М., Пасманник М.И.* Справочник по производству хлора, каустической соды и основных хлорпродуктов. Изд.2.: М. Химия. 1976.
3. *Тарасов В.А., Марангозов С.В.* Оптимизация производственных комплексов с переменными параметрами. М. Энергоатомиздат. 1985.

Особую эффективность от использования ЕАМ-систем могут ощутить те предприятия, которые уже выбрали и внедряют системы класса ERP (управление ресурсами предприятия). В связи с этим встроенные возможности интеграции Datastream с такими ERP-системами, как SAP R/3, Baan или Microsoft Business Solution Axapta являются серьезными конкурентными преимуществами этого решения по сравнению с другими аналогами.

По условиям заключенного контракта компания Весть должна ежегодно сертифицировать своих специалистов — технического и специалиста, знающего предметную область. Весной 2004 г. для специалистов Весть будет проведено специализированное обучение, в рамках которого будут рассматриваться не только вопросы функциональности решения, но и вопросы локализации продукта и обучения продажам. Первый проект внедрения системы будет осуществляться совместными усилиями Datastream и Весть.

В среднем продолжительность внедрения проекта на основе системы Datastream составляет 4...5 мес., а ориентировочная стоимость — около 100 000 Euro. Таким образом, основными потребителями таких решений являются средние и крупные промышленные предприятия и организации.

Контактный телефон (812) 102- 08-34. [Http://www.vestco.ru](http://www.vestco.ru)