**Высочин Николай Викторович. Оптимизация управления процессом синтеза углеводородов из моноокиси углерода и водорода на кобальтовых катализаторах : диссертация ... кандидата технических наук : 05.13.06.- Новочеркасск, 2001.- 149 с.: ил. РГБ ОД, 61 02-5/1475-7**

ЮЖНО-РОССИЙСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

(НПИ)

***На правах рукописи***



**ОПТИМИЗАЦИЯ УПРАВЛЕНИЯ ПРОЦЕССОМ СИНТЕЗА
УГЛЕВОДОРОДОВ ИЗ МОНООКИСИ УГЛЕРОДА И ВОДОРОДА
НА КОБАЛЬТОВЫХ КАТАЛИЗАТОРАХ**

Специальность 05.13.06 - «Автоматизация и управление технологическими
процессами и производствами (промышленность)»

**ДИССЕРТАЦИЯ**

**на соискание ученой степени
кандидата технических наук**

[аучные руководители:

доктор технических наук, профессор Петраков Владимир Александрович кандидат технических наук, доцент Савостьянов Александр Петрович

г.Новочеркасск - 2001 г.

**СОДЕРЖАНИЕ**

Введение 4

Глава 1 Анализ процесса синтеза углеводородов на Со­катализаторах как объекта управления

1. Физико-химические основы процесса 9
2. Кинетические математические модели ФТ-синтеза 18
3. Механизм ФТ-синтеза на Со-катализаторах 18
4. Формальная модель 23
5. Стохастическая формальная модель 25
6. Неформальная модель 26
7. Влияние природы катализатора на уравнение кинетики 28
8. Процесс синтеза на зерне катализатора 33
9. Анализ процесса в слое катализатора 36

Выводы 41

Глава 2 Моделирование стационарного процесса синтеза углеводородов

1. Постановка задачи моделирования 43
2. Кинетическая модель 45
3. Вывод кинетического уравнения 45
4. Размерность константы скорости реакции 48
5. Результаты моделирования кинетики 49
6. Выбор уравнения молекулярно-массового ^

распределения

1. Моделирование процесса на зерне катализатора 55
2. Математическое описание 55
3. Степень использования внутренней поверхности 58
	1. Моделирование процесса в слое катализатора 63
		1. Математическое описание 63
		2. Параметры математической модели 66
		3. Параметры настройки модели 76
	2. Оценка адекватности модели процесса 77

Выводы , 90

Глава 3 Моделирование динамики процесса 91

1. Динамическая модель процесса ФТ-синтеза 93
2. Расчет динамической модели 96

\*

■ *г ' '*

Выводы 108

Глава 4 Оптимизация управления процессом синтеза углеводородов

1. Математическое описание падения активности

109

катализатора

1. Критерий оптимизации 114
2. Метод оптимизации 116
3. Расчет оптимального управления процессом синтеза 120
4. Проектирование СУ процессом синтеза 125
5. Принцип автоматизации управления 125
6. Алгоритм управления 127

Выводы 130

Заключение 121

Литература 133

Приложение А. Алгоритм и описание программного обеспечения «FT-model»

Приложение Б Алгоритм и описание программного обеспечения «Динамика процесса»

**Введение**

**Актуальность темы.** Производство углеводородов из окиси углерода и водорода (процесс Фишера-Тропша) является альтернативным процессу перегонки нефти. Образующийся продукт представляет собой совокупность предельных и непредельных углеводородов, и побочных продуктов (кислоты, спирты), которые имеют почти равномерный закон распределения по молекулярной массе с неявно выраженным максимумом.

Синтез углеводородов из СО и Н2 представляет собой процесс образования длинных углеродных цепочек за счет химической реакции между СО и Н2 на поверхности катализатора, в качестве которого часто используется кобальтовый. Главным фактором, определяющим качество продукта синтеза, является селективность по целевой фракции, доля которой должна быть максимальной. Поэтому актуальным является повышение селективности процесса синтеза углеводородов.

Процесс синтеза проводят в специальных химических реакторах, которые представляют-собой трубчатые теплообменники с неподвижным слоем катализатора в трубном пространстве. На вход реактора подают синтез-газ, на 80% состоящий из СО и Н2 и 20% инертных газов (С02, N2, СГЦ). Далее на поверхности катализатора протекают параллельные и последовательные реакции между СО, Н2 и промежуточными соединениями, количество которых теоретически неограниченно. В процессе протекания этих реакций выделяется большое количество тепла. Перегрев в трубном пространстве ведет к потере активности катализатора и далее к его разрушению. Поэтому для отвода избыточного тепла в межтрубное пространство подается хладагент (вода). Состав продукта синтеза определяется температурным режимом: так повышение температуры ведет к преимущественному образованию легких углеводородов, а понижение температуры - тяжелых. На качество продукта также влияют давление в трубном пространстве, расход синтез-газа и состав синтез-газа. Таким образом, качество продукта имеет сложную зависимость от технологических параметров процесса и для его повышения необходимо осуществлять управление процессом посредством изменения этих параметров.

Существующий способ управления основан на статистическом анализе накопленного практического опыта и заключается в рекомендациях по изменению технологических параметров и состава катализатора. Однако неучет комплексных взаимосвязей между параметрами делает сложным

к •

достижение оптимального качества продукта Получение зависимости качества продукта синтеза от входных параметров синтез-газа и технологических параметров возможно с помощью математического моделирования каталитических процессов с неподвижным слоем катализатора В этой связи **актуальным** является создание способа управления, заключающегося в реализации оптимального закона изменения технологических параметров с помощью математической модели процесса синтеза углеводородов.

**Цель и задачи работы.** Целью диссертационной работы является повышение эффективности управления процессом синтеза углеводородов путем поиска оптимальных технологических режимов по математической модели процесса в зависимости от оценки текущего состояния продукта.

Для достижения поставленной цели в работе решаются следующие **научные задачи.**

* анализ процесса синтеза углеводородов как объекта управления;
* создание математической модели стационарного процесса синтеза углеводородов на кобальтовых катализаторах;
* создание математической модели нестационарного процесса;
* разработка способа управления процессом;
* оптимизация управления процессом синтеза углеводородов с помощью динамической модели процесса;
* построение функциональной и алгоритмической структуры системы управления с динамической моделью процесса;

**Новизна научных положений,** выносимых на защиту:

1. создана динамическая модель процесса синтеза углеводородов на

кобальтовых катализаторах, описывающая объемные

температурные и концентрационные поля в реакторе синтеза и

- распределение углеводородов в продукте, позволяющая исследовать процесс при различных технологических режимах и отличающаяся новым подходом к моделированию кинетики процесса, основанным на объединении формального уравнения скорости химической реакции и уравнения распределения углеводородов в продукте. Исследование динамической модели позволило установить практически важные ограничения на технологические параметры, сформулировать задачи управления из условия квазистационарности процесса синтеза

углеводородов;

1. предложен способ управления процессом, заключающийся в

определении в каждый дискретный момент времени с помощью настраиваемой на характеристики реального объекта

математической модели по результатам сравнения расчетных и действительных параметров продукта значений технологических параметров, обеспечивающих максимум селективности и производительности процесса по желаемому продукту;

1. предложен принцип настройки математической модели,

заключающийся в определении значений корректирующих коэффициентов, соответствующих текущему состоянию процесса, путем последовательного сравнения действительных значений параметров продукта и результатов моделирования процесса с использованием элементов базы данных,

представляющих собой совокупность информации об условии проведения процесса, качестве продукта и соответствующих им значениях корректирующих коэффициентов;

1. создана алгоритмическая структура СУ процессом синтеза углеводородов, включающая настраиваемую на характеристики реального объекта математическую модель и алгоритм поиска

- оптимального закона изменения технологических параметров, обеспечивающего максимум целевой фракции в продукте синтеза.

**Практическая ценность работы:**

1. определены параметрические чувствительности технологических параметров, согласно которым выявлена практически важная закономерность их участия в управлении процессом по убыванию степени влияния на состояние процесса: температура хладагента, расход синтез-газа, состав синтеза-газа, давление;
2. выявлены особенности формирования управления процессом, заключающиеся в учете взаимосвязей технологических параметров: температуры хладагента и расхода синтез-газа, которые имеют обратную зависимость. Так, повышение расхода ведет к уменьшению температуры в трубке реактора за счет увеличения линейной скорости потока газа и, следовательно, съема тепла, и наоборот. Данные особенности позволяют осуществлять более эффективное управление процессом в существующих производственных условиях;
3. определены ограничения на скорость изменения технологических параметров по модели нестационарного процесса, позволяющие на практике избежать выхода состояния процесса из области допустимых значений;
4. создано программное обеспечение, реализующее алгоритмы расчета моделей стационарного и нестационарного процесса синтеза углеводородов на кобальтовых катализаторах и алгоритм поиска оптимального закона управления процессом, позволяющее автоматизировать исследования процесса синтеза

за счет обеспечения удобного пользовательского интерфейса с поддержкой операционной системы Windows.

**Методы исследования. В** работе в качестве основного метода моделирования процесса синтеза углеводородов использован квазигомогенный метод моделирования каталитических процессов с неподвижным слоем катализатора; метод конечно-разностных уравнений для

к

решения задач математического моделирования, методы теории управления и принятия решений.

**Внедрение основных результатов диссертационной работы.**

Полученная математическая модель процесса ФТ-синтеза на кобальтовых катализаторах признана адекватно описывающей процесс синтеза, реализованный на производстве №3 НЗСП, и рекомендована к использованию в практике управления процессом. Созданное программное обеспечение используется в учебном процессе ЮРГТУ (НПИ) на кафедре автоматики и телемеханики.

**Апробация работы.** Основные положения и результаты, полу ченные в диссертационной работе, опубликованы в 7 печатных работах, доложены, обсуждены и получили положительную оценку на международных научно­технических конференциях «Математические методы в технике и технологии» (С.-Петербург, 2000г.), «Новые технологии управления движением технических объектов» (Новочеркасск, 2000 г.).

Структура и объем работы. Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения, библиографического списка использованной литературы, включающего 57 наименований, 2 приложений. Работа изложена на 136 страницах машинописного текста, содержит 38 рисунков и 14 таблиц.

**Заключение**

В диссертационной работе получены следующие результаты:

1. Создана математическая модель стационарного процесса синтеза углеводородов из ***СО*** и ***Н2*** на кобальтовых катализаторах, адекватно описывающая процесс (максимальная относительная погрешность составляет ***16%).*** Предложен новый способ моделирования кинетики процесса синтеза, заключающийся в объединении формального уравнения скорости химической реакции и уравнения распределения углеводородов в продукте и отличается простотой (малое число коэффициентов, определяемых экспериментальным путем) и полнотой (учитываются взаимосвязи основных технологических параметров).
2. Создана модель нестационарного процесса синтеза углеводородов из ***СО*** и ***Н2*** на Сокатализаторах, описывающая изменение состояния процесса во времени при возмущающих воздействиях. Установлено, что процесс синтеза углеводородов относится к квазистатическим процессам, в

- связи с чем достаточно решать стационарную задачу оптимизации
управления процессом с учетом процесса падения активности катализатора.

1. Разработано программное обеспечение для расчета модели стационарного процесса «FT-model», позволяющее моделировать процесс, производить настройку модели, рассчитывать оптимальный закон управления процессом. Разработано программное обеспечение для расчета динамической модели «Динамика процесса», реализующее сеточный метод решения дифференциальных уравнений в частных производных, позволяющее моделировать динамику процесса при различных возмущениях, обеспечивающее удобный пользовательский интерфейс и поддержку оперативной системы Windows.

 Определены граничные условия на скорость изменения управляющих переменных, позволяющие удерживать состояние процесса в области допустимых значений.