

Баглаев Станислав Николаевич

магистрант

Тихомиров Сергей Германович

д-р техн. наук, профессор

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный

университет инженерных технологий»

г. Воронеж, Воронежская область

DOI 10.21661/r-461698

РАЗРАБОТКА МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ПРОЦЕССА ПОЛИМЕРИЗАЦИИ БУТАДИЕНА С УЧЕТОМ КАЧЕСТВЕННЫХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ

***Аннотация:** управление процессом полимеризации осуществляется по показателю качества вязкости по Муни. Одной из проблем в производстве полимеров является контроль конверсии мономера, т.к. этот параметр определяет эффективность производства. Поэтому в качестве управляемого параметра, помимо вязкости, также введена конверсия мономера. Оценка значений вязкости и конверсии мономера осуществляется по разработанной математической модели с использованием ЭВМ. Целью работы является разработка и идентификация параметров математической модели процесса полимеризации бутадиена с учетом качественных показателей. Для реализации поставленной задачи разработан программный модуль. Основная задача управления процессом полимеризации бутадиена заключается в стабилизации вязкости по Муни.*

***Ключевые слова:** полимеризация бутадиена, конверсия мономера, вязкость по Муни, математическая модель, программное обеспечение.*

Математическая модель процесса непрерывной полимеризации бутадиена в каскаде последовательно соединенных реакторов представляет собой систему нелинейных дифференциальных уравнений материального баланса, уравнения

расчета конверсии мономера и вязкости по Муни и начальных условий. Концентрация активных центров определяется через концентрации компонентов каталитического комплекса [1]

$$\begin{cases} \frac{dm_{(k)}(t)}{dt} = \frac{1}{\tau} \cdot (m_{(k-1)}(t) - m_{(k)}(t)) - k_p \cdot e^{-\frac{E}{R \cdot T_{(k)}}} \cdot m_{(k)}(t) \cdot c_{(k)}^*, \\ x_{(k)} = \frac{m_0 - m_{(k)}}{m_0}, \\ Mh_{(k)} = M \cdot x_{(k)}^{M1} \cdot e^{\frac{M2}{T_{(k)}}}. \end{cases}$$

Начальные условия:

$$\begin{cases} m_{(k)}(0) = m_{(k-1)}(\tau); m_{(1)}(0) = m_{(нач)}, \\ c_{(k)}^* = \begin{cases} So \cdot [Ti], So < 1, \\ [Ti] - \frac{1}{2} \left([Al] + k_a - \sqrt{4[Ti]^2 \cdot (So - 1) - ([Al] + k_a)^2} \right), So \geq 1. \end{cases} \end{cases}$$

где k – номер реактора, $k=\overline{1,5}$;

$m_{(k)}(t)$ – концентрация мономера в растворе, доли;

τ – среднее время пребывания в реакционной зоне, ч;

t – текущее время, ч;

$c_{(k)}^*$ – концентрация активных центров, доли;

k_p – константа скорости роста цепи, 1/доли·ч;

R – универсальная газовая постоянная, $R=8,31$ Дж/(моль·К);

E – энергия активации, Дж/моль;

$T_{(k)}$ – температура в реакторе, К;

$x_{(k)}$ – конверсия мономера, %;

$Mh_{(k)}$ – вязкость по Муни, единиц Муни;

$M, M1, M2$ – постоянные коэффициенты, $M=7,12524668$, $M1=0,503744124$, $M2=-16,1112905$;

k_a – константа активации, $k_a=0,16098753$, безразмерный;

So – соотношение катализаторов, определяющееся как $So=[Al]/[Ti]$;

$[Al]$ – концентрация триизобутилаллюминия (изо- C_4H_9)₃Al, доли;

$[Ti]$ – концентрация TiI_4 , доли.

Для адаптации математической модели к условиям реального производства осуществлена ее идентификация с целью оценки значений коэффициентов: константы скорости роста полимерной цепи (K_p) и энергии активации (E). Расчет производился по данным полученным в процессе промышленной эксплуатации. Интегрирование системы дифференциальных уравнений реализовано методом Рунге-Кутты 4-ого порядка. Поиск коэффициентов, минимизирующих критерий производился методом покоординатного спуска. Точность полученных результатов оценивается путём определения относительной погрешности для вязкости по Муни [2].

С целью идентификации и расчета математической модели полимеризации бутадиена разработано программное обеспечение, использующее для своей работы базы данных исходных параметров и конечных результатов.

Программное обеспечение позволяет осуществлять идентификацию для различных наборов исходных данных режимных параметров процесса с целью определения коэффициентов K_p и E и производить расчет процесса по модели с использованием найденных коэффициентов, сохранять результаты идентификации и расчета в базе данных, а также проводить имитацию процесса с целью исследования поведения модели во времени.

Главное окно программы выглядит следующим образом (рис. 1).

Программа

Файл Параметры

Исходные данные

Номер набора: 1 Всего записей: 6

Набор

Расход дивинила	2.50	т/ч
Расход растворителя	16.00	т/ч
Расход ДДТ	122.00	кг/ч
Расход ТИБА	75.00	кг/ч
Соотношение	2.64	

Температура по аппаратам, °C

I	32.50
II	31.50
III	35.00
IV	36.50
V	33.00

Опытное значение вязкости: 40.0 ед.Муни

Элементы управления

Назад Вперёд

Первый Последний

Создать Удалить

Сохранить

Начальные приближения

k:

E:

Определённые коэффициенты

k:

E:

Значение критерия S:

Количество итераций:

Расчёт

Заново

Результаты

Далее

Выход

Данные для расчёта

Добавить

Очистить

Дополнительные данные

☒ Не показывать

☐ Показывать

Рис. 1. Окно «Идентификация» программы

В этом окне можно произвести расчет конверсии и вязкости, их распределений по аппаратам, а также пластичности. Оценка адекватности модели осуществляется по относительным погрешностям, значения которых выводятся в соответствующем окне.

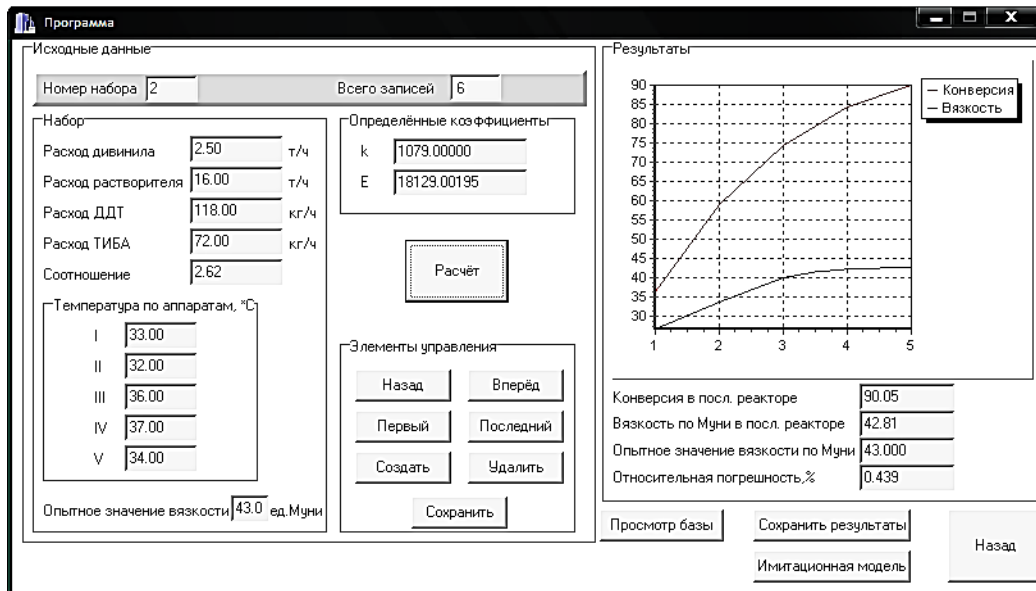


Рис. 2. Окно «Расчёт» программы

Программное обеспечение включает в себя базу данных результатов (рис. 3), где содержатся исходные данные, полученные значения контролируемых параметров и коэффициентов, с которыми данные значения были получены, а также значения относительных погрешностей.

База данных

Таблица результатов:

RD	RR	RDDT	RTIBA	S	T1	T2	T3	T4	T5	KON	MH	MH_R	O	E	K
2.5	16	115	82	3.15	31.5	27	27.5	36	40	89.5	37	45.8	21.6	18201.09961	1121.09998
2.5	16	115	70	2.7	32.5	28.5	28	35.5	39.7	90	37	45.8	21.6	18201.09961	1121.09998
2.5	16	107	69	2.72	31.5	28.5	29	37	41.5	89.6	40	46.5	15	18201.09961	1121.09998
2.5	16	122	75	2.64	32.5	31.5	35	36.5	33	89.7	40	42.1	5.32	18129.00195	1079
2.5	16	118	72	2.62	33	32	36	37	34	90	43	42.8	0.44	18129.00195	1079
2.5	16	113	75	2.65	32	27.5	34	36	36	88.5	46	43.6	5.27	18129.00195	1079
3	19.6	130	88	2.67	31.2	31.5	39	40.5	44	90.2	44	47.7	8.45	18129.00195	1079
3	19.6	135	96	2.9	31	32	39	40	44	90.5	51	47.8	6.29	18129.00195	1079
2.5	16	108	84	3.05	30.5	28	31.5	34.5	37.5	87.6	50	44.1	11.8	18129.00195	1079
2.5	16	115	70	2.7	34.5	29	28.5	30	32	88.8	30	41.3	37.6	18129.00195	1079
2.5	16	115	82	3.15	31.5	27	27.5	36	40	89.3	37	45.8	23.7	18129.00195	1079
2.5	16	115	70	2.7	32.5	28.5	28	35.5	39.7	89.8	37	45.8	23.7	18129.00195	1079
2.5	16	107	69	2.72	31.5	28.5	29	37	41.5	89.4	40	46.5	16.2	18129.00195	1079
2.5	16	122	75	2.64	32.5	31.5	35	36.5	33	89.7	40	42.1	5.32	18129	1079

Определённые коэффициенты:

K	E	CHAR
877	16079	1_2_3_6_
1121.09998	18201.09961	2_3_6_
1121.09998	18201.09961	2_3_6_
1079	18129.00195	1_2_3_4_5_6_

Назад

Рис. 3. Окно «База данных» программы

Имеется возможность имитационного моделирования процесса для выбранного набора и полученных значений коэффициентов, осуществляемая нажатием кнопки «Имитационная модель» (рис. 4).

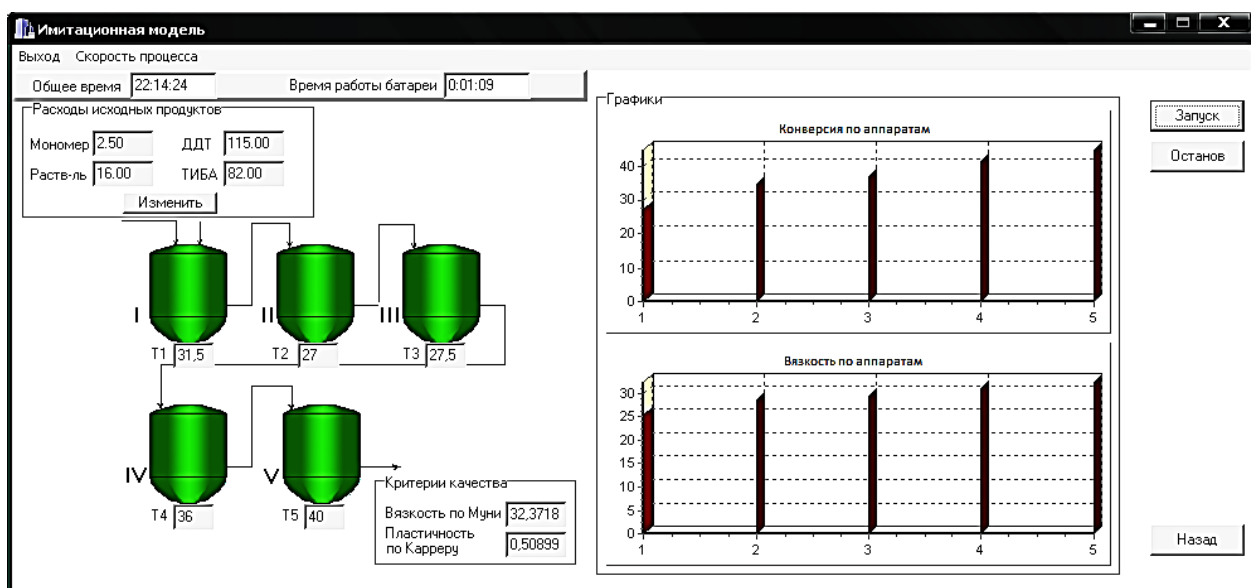


Рис. 4. Окно «Имитационная модель» программы

В результате работы получены распределения конверсии мономера и вязкости по Муни по аппаратам реакторного каскада. Результаты расчётов для всех наборов исходных данных приведены в Таблицах 1 и 2. Анализируя полученные результаты, можно сделать вывод, что предложенная модель адекватно описывает процесс растворной полимеризации бутадиена.

Таблица 1

Результаты расчёта

№ опыта	Расход дивинила, т/ч	Расход растворителя, т/ч	Расход ДДТ, кг/ч	Расход ТИБА, кг/ч	Соотношение
1	2,5	16	122	75	2,64
2	2,5	16	118	72	2,62
3	2,5	16	113	75	2,65
4	3	19,6	130	88	2,67
5	3	19,6	135	96	2,9
6	2,5	16	108	84	3,05

Результаты расчёта

№ опыта	Температура по аппаратам, °C					Опытная вязкость	Рассчитанная. вязкость	Относительная погрешность, %	Определенные коэффициенты	
	I	II	III	IV	V				k	E
1	32,5	31,5	35	36,5	33	40	42,13	5,322	1079	18129.001
2	33	32	36	37	34	43	42,81	0,439		
3	32	27,5	34	36	36	46	43,57	5,273		
4	31,2	31,5	39	40,5	44	44	47,72	8,446		
5	31	32	39	40	44	51	47,79	6,292		
6	30,5	28	31,5	34,5	37,5	50	45,52	8,96		

Список литературы

1. Математическое моделирование объектов управления в химической промышленности / В.К. Битюков, С.Г. Тихомиров, С.В. Подкопаева, Е.А. Хромых, И.А. Хаустов, А.А. Хвостов // Теория и практика / Воронежский государственный университет инженерных технологий. – Воронеж, 2011.

2. Управление качеством в процессах растворной полимеризации / В.К. Битюков, В.Ф. Лебедев, С.Г. Тихомиров, А.А. Хвостов, И.А. Хаустов. – Воронеж, 2008.