

COLLECTION OF RESEARCH PAPERS

of the 8th International Research and Practical Conference

**CHEMICAL TECHNOLOGY:
SCIENCE, ECONOMY AND PRODUCTION**

ЗБІРНИК НАУКОВИХ ПРАЦЬ

VIII Міжнародної науково-практичної конференції

**ХІМІЧНА ТЕХНОЛОГІЯ:
НАУКА, ЕКОНОМІКА ТА ВИРОБНИЦТВО**



МІНІСТЕРСТВО
ОСВІТИ І НАУКИ
УКРАЇНИ



ISSN 2786-4898

Міністерство освіти і науки України
Сумський державний університет
Шосткинський інститут Сумського державного університету
Центральний науково-дослідний інститут
озброєння та військової техніки збройних сил України
Публічне акціонерне товариство «Фармак»
Управління освіти Шосткинської міської ради
Виконавчий комітет Шосткинської міської ради

COLLECTION OF RESEARCH PAPERS

of the 8th International Research and Practical Conference

CHEMICAL TECHNOLOGY: SCIENCE, ECONOMY AND PRODUCTION



ЗБІРНИК НАУКОВИХ ПРАЦЬ

VIII Міжнародної науково-практичної конференції
**ХІМІЧНА ТЕХНОЛОГІЯ:
НАУКА, ЕКОНОМІКА ТА ВИРОБНИЦТВО**

(м. Шостка, 27-29 листопада 2024 року)



Суми

Сумський Державний Університет

2024

УДК 66.01

Редакційна колегія:

Головний редактор Закусило Р.В., доцент кафедри хімічної технології високомолекулярних сполук, к.т.н., доцент.

Заступник головного редактора Павленко О.В., завідувач кафедри хімічної технології високомолекулярних сполук, к.т.н.

Відповідальний секретар Скуба Ю.Г. фахівець кафедри економіки та управління Шосткинського інституту Сумського державного університету.

Члени редакційної колегії:

Кравець В.Г. – професор кафедри хімічної технології високомолекулярних сполук, д.т.н., професор;

Худолей Г.М. – завідувач кафедри системотехніки і інформаційних технологій, к.т.н;

Тур О.М. – доцент кафедри економіки та управління, к.е.н.;

Тимофіїв С.В. – ст. викладач кафедри хімічної технології високомолекулярних сполук, к.х.н.;

Пригара І.О. – ст. викладач кафедри економіки та управління, к.е.н.

Збірник наукових праць VIII Міжнародної науково-практичної конференції «Хімічна технологія: наука, економіка та виробництво», м. Шостка, 27 - 29 листопада 2024 року. – Суми : Сумський державний університет, 2024. – 242 с.

ISSN 2786-4898.

Збірник містить наукові праці учасників VIII Міжнародної науково-практичної конференції «Хімічна технологія: наука, економіка та виробництво», що складаються з узагальнених матеріалів науково-дослідних робіт науковців різних галузей виробництва та наукових закладів України.

У збірнику висвітлюються актуальні питання спеціальної хімічної технології і виробництва боєприпасів, утилізації відходів виробництва різних галузей, енергозбереження, моделювання технологічних процесів, соціально-економічні аспекти виробництва та природокористування в умовах війни.

Збірник корисний робітникам хімічної промисловості, науковим співробітникам, аспірантам і студентам спеціальностей хіміко-технологічного та соціально-економічного профілів, фахівцям інформаційних технологій виробництва.

Наукові праці учасників конференції подаються в авторській редакції.

© Шосткинський інститут
Сумського державного університету, 2024
© Сумський державний університет, 2024

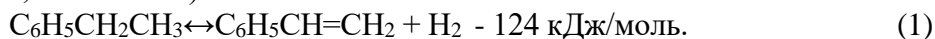
ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ ОПТИМАЛЬНОГО УПРАВЛІННЯ ПРОЦЕСОМ ДЕГІДРУВАННЯ ЕТИЛБЕНЗОЛУ ДО СТИРОЛУ

Г.М. Худoley, Б.С. Яскевич

Шосткинський інститут Сумського державного університету
hudoley1951@gmail.com

Стирол являється однією з найважливіших речовин основного органічного синтезу, яка в значних кількостях використовується як сировина (мономер) для виробництва синтетичних каучуків та пластмас [1]. Так за даними [2] в 2024 році обсяг виробництва стиролу в світі оцінюється в 34,44 мільйонів тон з середньорічним приростом приблизно 5,32% за рахунок збільшення попиту на нього в таких галузях промисловості як упаковка, будівництво, виробництво автомобілів та інше.

За хімічним складом ($C_6H_5CH=CH_2$) стирол відноситься до групи ароматичних вуглеводнів. Близько 90% світового виробництва стиролу отримується в результаті оборотної ендотермічної каталітичної реакції дегідрування етилбензолу, яка відбувається при 550-650 °С в присутності гетерогенного каталізатора (зазвичай це оксиди металів Fe, Mn та інше) за основною схемою



Одночасно з основною протікає низка побічних реакцій деструкції (крекінгу) етилбензолу і взаємодії їх продуктів, що приводить до утворення бензолу, толуолу, а також метану, етану і оксиду вуглецю в відносно незначних кількостях.

Технологічний процес отримання стиролу. Процес отримання стиролу в виробничих умовах протікає в дві стадії:

беспосередньо дегідрування етилбензолу в двоступеневих адіабатичних контактних реакторах;

виділення стиролу з суміші продуктів дегідрування етилбензолу (пічної оливи) в процесі ректифікації.

Виконаємо конструктивно-технологічний аналіз стадії дегідрування етилбензолу як такої, що визначає основний вплив на ефективність технологічного процесу. Технологічна схема процесу дегідрування етилбензолу в двоступеневому адіабатичному контактному реакторі продемонстрована на рис. 1.

Етилбензол (сировина для отримання стиролу) подається в теплообмінник 1, де попередньо підігривається до 80 °С відпрацьованим водяним конденсатом з наступних стадій виробництва з метою утилізації теплоти і направляється для подальшого нагріву в випарник 2, в якому перегрітою водяною парою випаровується і нагрівається до температури 210 °С. Одночасно частина (приблизно 10%) пари змішується з етилбензолом, а залишок після віддачі теплоти в випарникові 2 направляється в пароперегрівач ба, в якому нагрівається за рахунок спалювання природного газу до температури 630 °С.

Нагрітий у випарникові 2 етилбензол перегрівається в перегрівачеві 3 до майже робочої температури 550 °С за рахунок відпрацьованої пари з теплообмінника адіабатичного реактора 4 і подається в верхню його частину 5, в якій розбавляється перегрітою парою з температурою 630 °С для того, щоб знизити парціальний тиск пари етилбензолу і змістити реакцію в сторону отримання стиролу.

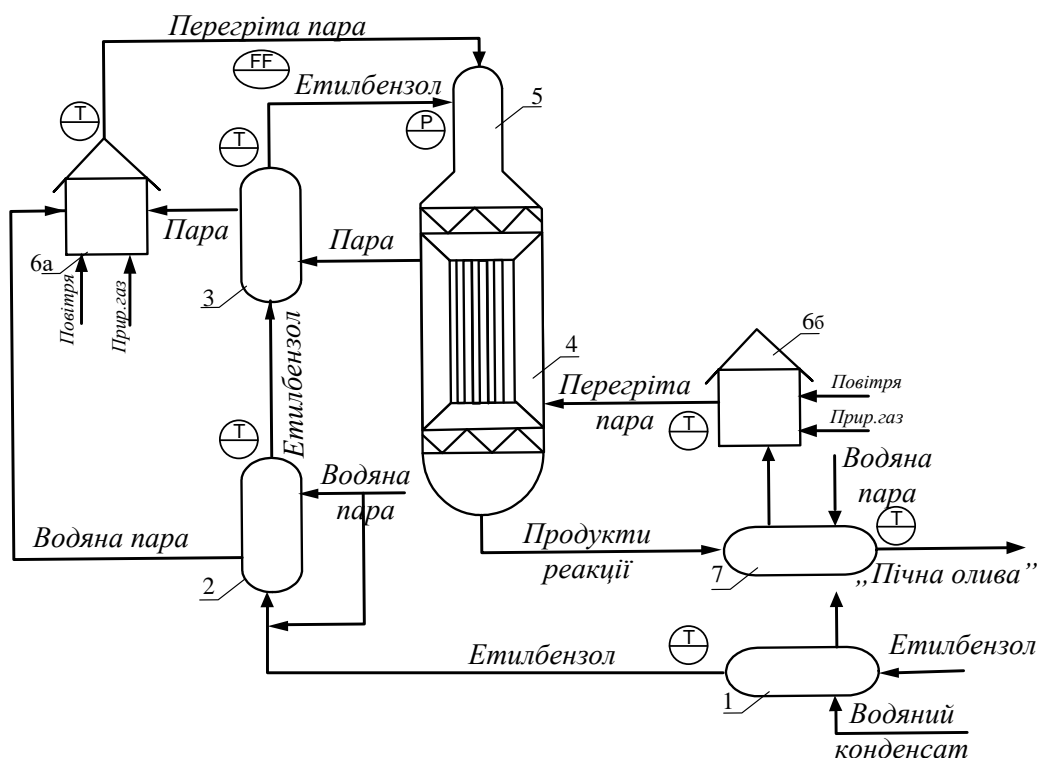


Рис.1 - Технологічна схема стадії дегідрування етилбензолу в виробництві стиролу:

- 1 - теплообмінник; 2 - випарник; 3 - перегрівач; 4 - міжступінчатий теплообмінник; 5 - адіабатичний реактор; 6а, 6б - пароперегрівна піч; 7 - котел-утилізатор

Суміш перегрітої пари та етилбензолу надходить в верхній шар каталізатора реактора 5, де в результаті реакції дегідрування етилбензолу температура продуктів реакції зменшується до 585 °С. Проміжний теплообмінник 4, що знаходиться в одному корпусі з реактором 5, забезпечує підвищення температури продуктів реакції до 630 °С за допомогою перегрітої пари, що поступає з пароперегрівної печі 6б. Продукти реакції після проходження другого шару каталізатора мають необхідну ступінь перетворення етилбензолу і поступають в котел-утилізатор 7, де їхня температура зменшується, а теплота повертається в процес. Отримані продукти реакції в вигляді так званої «пічної оливи» поступають на склад або на ректифікацію.

Аналіз процесу дегідрування як об'єкту управління. Для створення ефективної системи управління будь-яким складним технічним об'єктом необхідна наявність достовірної (адекватної) математичної моделі, або, як мінімум, глибокої вивченості фізико-хімічних явищ, що протікають в ньому, а також раціонального вибору критеріальної стратегії управління.

З цієї точки зору процес дегідрування етилбензолу до стиролу в адіабатичному реакторі являє собою деякий «сірий ящик» [3] в силу недостатньої вивченості основних закономірностей та факторів, що впливають на ступінь перетворення етилбензолу та на селективність основної хімічної реакції (1).

Аналіз літературних джерел дозволяє сформулювати деякі головні узагальнені висновки:

ступінь перетворення етилбензолу зростає при збільшенні температури реакційної суміші (шихти) в адіабатичному реакторі (див. рис. 2) [4]. Разом з тим зі

збільшенням температури в зоні реакції збільшується вихід продуктів побічних реакцій, що приводить до таких негативних наслідків, як [1,5,6]:

відповідне зменшення кількості стиrolу в продуктах реакції;

надлишкова витрата енергії як на протікання побічних ендотермічних реакцій, так і на необхідність підтримання більш високої температури;

зменшення активності каталізатора через утворення на його поверхні коксової плівки, що приводить до зменшення періоду роботи реактора між циклами регенерації;

так як об'єм продуктів реакції в два рази більший ніж об'єм вихідного етилбензолу, то реакцію дегідрування етилбензолу (1) бажано вести при зменшеному парціальному тискові етилбензолу [1]. Цього ефекту досягають розбавленням вихідної сировини інертною речовиною (звичай це водяна пара), яка одночасно виконує роль теплоносія. Для зменшення парціального тиску етилбензолу на 0,01 МПа необхідно 1 кг етилбензолу розбавити 2,6 кг перегрітої водяної пари. Залежність рівноважного ступеня дегідрування етилбензолу в стиrol від величини співвідношення водяна пара:етилбензол при температурі 580 °C наведена в табл.2 [8].

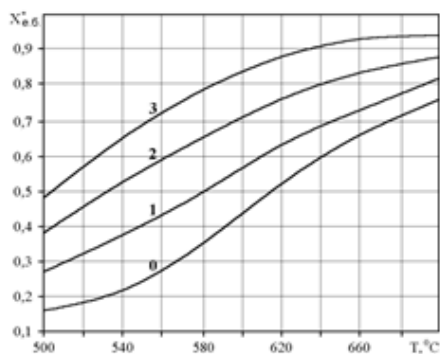


Рис. 2 - Залежність рівноважного ступеня перетворення етилбензолу від температури в реакторі при різному масовому співвідношенні водяної пари до етилбензолу (0, 1, 2, 3)

Таблиця 1 - Залежність рівноважного ступеня перетворення етилбензолу від величини співвідношення водяної пари до етилбензолу при температурі в реакторі 580 °C

Відношення $H_2O:C_8H_{10}$	Рівноважний ступінь дегідрування, %
0	35
16	47
19	78
20	79

Необхідно зауважити, що незважаючи на теоретичну можливість завдяки відповідному розбавленню етилбензола водяною парою, досягнення величини рівноважного ступеню перетворення етилбензолу близько 79% (див. табл. 1), на практиці обмежуються величиною співвідношення H_2O :етилбензол, що дорівнює (4-2):1, що очевидно пов'язане з необхідністю мінімізації витрати енергії на нагрівання додаткової кількості водяної пари.

Постановка задачі оптимального управління.

Питанням автоматизації та розробки математичних моделей технологічного процесу дегідрування етилбензолу в стиrol в літературних джерелах приділяється не дуже багато уваги [3,5,9].

В основному автоматизація процесу отримання стиrolу зводиться до стабілізації основних регламентних змінних на тих рівнях, що визначились в результаті багаторічних спостережень, тобто основаних на практичному досвіді. І лише в окремих роботах автори торкаються питань оптимального управління розглянутим вище процесом на постановочному рівні. Так в [9] пропонується використовувати екстремальне управління, але при цьому не вказується яка технологічна змінна володіє екстремальними характеристиками. В роботі [3] автори рекомендують

виконувати регулювання витрат паливного газу на підігрів пари (поз. ба, бб; на рис.1) з урахуванням прогнозу динаміки управляемого об'єкта за математичною моделлю на кінцевому відтинку часу (горизонті прогнозування), однак, на жаль, така модель, або хоча б принципи її створення не наводяться.

Маючи на увазі результати аналізу процесу дегідрування етилбензолу як об'єкта управління, зформульовані вище, нескладно дійти висновку, що для досягнення якомога більшого ступеню перетворення етилбензолу в стирол (тобто збільшення виходу кінцевого продукту) бажано максимально підвищувати температуру в зоні реакції та збільшувати співвідношення H_2O :етилбензол. Але, оскільки при цьому будуть зростати витрати енергії на побічні реакції і, відповідно, зменшиться вихід стиролу, то з'являється необхідність обмеження цих змінних на «розумному» рівні, що фактично і виконується на практиці методом проб та помилок. Щоб надати цій процедурі об'єктивний характер, необхідно формалізувати процес визначення оптимальних величин змінних ведення технологічного процесу шляхом вибору відповідного критерію оптимальності.

Якщо звернути увагу на те, що реакція отримання стиролу (1) протікає в одну стадію, то можна припустити, що тепловий ефект цієї реакції ($\Delta H = 124$ кДж/моль) власне і є тією мінімально-необхідною енергією, яка використовується на синтез корисного продукту. Вся інша енергія, що витрачається понад величину теплового ефекту – це невикористані витрати, пов'язані з протіканням побічних реакцій та безповоротними тепловими втратами. Таким чином, цілком логічно було б поставити задачу мінімізації надлишкових витрат енергії, але в цьому випадку оптимальні значення змінних процесу дегідрування етилбензолу в стирол будуть зміщуватись в бік мінімальних значень, що негативно позначиться на продуктивності. Але якщо мінімізацію надлишкових витрат енергії вести при умові збереження заданої величини ступеню перетворення етилбензолу, то знайдені значення змінних процесу конверсії етилбензолу набувають смислу оптимальних. Крім того, подібний підхід надає можливість автоматично корегувати режим роботи реактора в залежності від зменшення активності каталізатора, забезпечуючи постійність продуктивності між циклами регенерації.

Таким чином, як критерій оптимізації доцільно використати вираз

$$R(\vec{X}) = E_{\phi}(\vec{X}) - \Delta H \vec{\rightarrow} \min \quad (2)$$

$$\text{при умові } S_{EB} = S_{EB}^* \text{ та рівняннях зв'язку } \varphi(\vec{X}) = 0, \quad (3)$$

де \vec{X} – вектор незалежних змінних (в цьому випадку це температура в реакторі і співвідношення H_2O :етилбензол; $E_{\phi}(\vec{X})$ - фактична витрата енергії в реальному процесі отримання стиролу (на 1 кг); ΔH – тепловий ефект реакції (1); S_{EB}^* - задана мінімальна ступінь перетворення етилбензолу; $\varphi(\vec{X})$ – математична модель статичного режиму роботи об'єкта.

З урахуванням (2) і (3) функціональна схема системи оптимального управління процесом дегідрування етилбензолу в статичному режимі може бути представлена в вигляді, показаному на рис. 3.

В режимі реального часу ведеться спостереження за вхідними \vec{X}_E та вихідними \vec{Y}_E змінними об'єкта управління та їх усереднення на деякому інтервалі часу ΔT , який формується таймером.

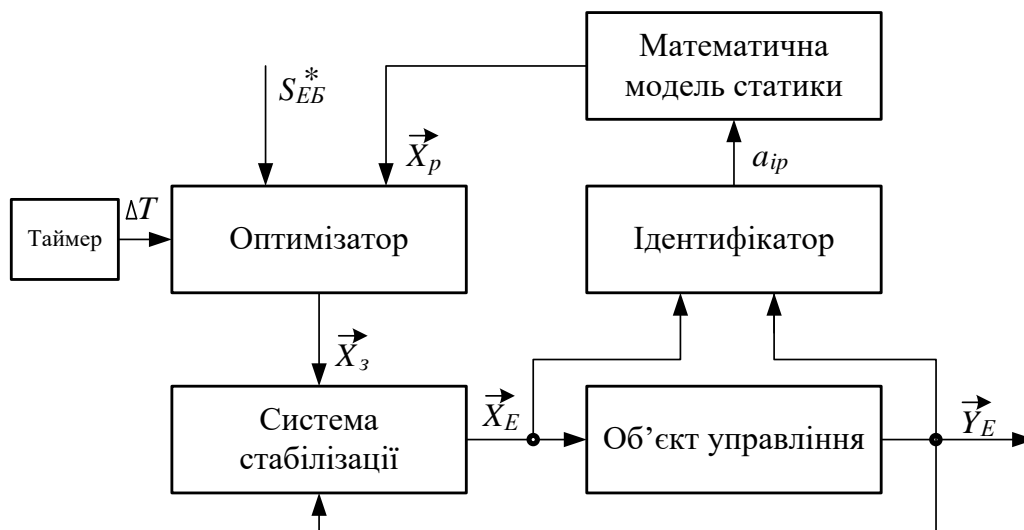


Рис. 3 - Функціональна схема системи оптимального управління процесом дегідрування етилбензолу в стирол

На кожному відтинку часу ΔT ідентифікатор виконує ідентифікацію параметрів a_{ip} математичної моделі статички процесу за усередненими даними спостереження з метою їх актуалізації. На основі уточнених значень параметрів a_{ip} з використанням математичної моделі розраховуються невимірювані змінні процесу, а оптимізатор розраховує оптимальні значення уставок для локальних систем стабілізації, завданням яких є підтримання оптимального режиму.

Висновки.

Виконано аналіз процесу дегідрування етилбензолу в стирол як об'єкта управління: показана відсутність у об'єкта екстремальних властивостей.

Запропоновано як критерій оптимізації процесу використати величину надлишкової витрати енергії при фіксованому мінімальному значення співвідношення H_2O :етилбензол.

Запропонована функціональна схема системи оптимального управління процесом дегідрування етилбензолу в стирол з використанням стабілізації незалежних змінних на рівні, що обчислюється оптимізатором, який використовує змінні, розраховані за математичною моделлю статички з періодичним уточнення параметрів моделі за допомогою ідентифікатора.

Список літературних джерел.

1. Зыков Д. Д. и др., Общая химическая технология органических веществ, М.: Химия, 1966.
2. Анализ размера и доли рынка стирола – тенденции роста и прогнозы (2024–29 г.) [Електронний ресурс] Режим доступу до ресурсу: <https://www.mordorintelligence.com/ru/industry-reports/styrene-market>.
3. Попов А. П., Битюков В. К. и др. Системный анализ реактора дегидрирования этилбензола как объекта управления // Вестник ВГУИТ. 2018. Т. 80. № 2. - С. 77–85.
4. Методичні вказівки до лабораторної роботи «Виробництво стиролу каталітичним дегідруванням етилбензолу» з дисципліни «Загальна хімічна технологія». / Укл.: В.А.Мазін. – Дніпропетровськ: УДХТУ, 2003 – 20 С.

5. Управление процессом дегидрирования этилбензола в стирол в нестационарных условиях [Электронный ресурс] / [А. М. Алиев, И. И. Османова, А. Р. Сафаров та ін.]. – 2016. – С. 17–22 - Режим доступу до ресурсу: <https://akj.az/ru/journals/339>.

6. Битюков В.К., Жатова И.А и др. Разработка математической модели кинетики процесса дегидрирования этилбензола в двухступенчатом адиабатическом реакторе непрерывного действия // Вестник ВГУИТ. Серия: информационные технологии, моделирование и управление. 2015. № 2 (64). С. 55–60.

7. Журавлева К.А., Назаров А.А. Получение стирола дегидрированием этилбензола // Вестник Казан. технол. унив., 2012. С. 149.

8. Получение стирола дегидрированием этилбензола. Режим доступу до ресурсу: https://studref.com/515273/matematika_himiya_fizik/poluchenie_stirola

9. Автоматизация процесса получения стирола из этилбензола [Электронный ресурс] Режим доступу до ресурсу: <https://www.engineer-oht.ru/avtomatizaciya-tp/avtomatizaciya-tehnologii/573-avtomatizaciya-processa-polucheniya-stirola>