

**СИНТЕЗ СТРУКТУРЫ ПРОГНОЗИРУЮЩЕЙ МОДЕЛИ  
СИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ РЕАКТОРОМ  
ДЕГИДРИРОВАНИЯ ЭТИЛБЕНЗОЛА**

**С. Г. Тихомиров<sup>1</sup>, С. Л. Подвальный<sup>2</sup>,  
А. П. Попов<sup>1</sup>, О. Г. Неизвестный<sup>2</sup>**

*Кафедра информационных и управляющих систем,  
ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет  
инженерных технологий» (1); г. Воронеж, Россия; aleksej\_p\_91@mail.ru;  
кафедра автоматизированных и вычислительных систем,  
ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический  
университет» (2), г. Воронеж, Россия*

**Ключевые слова:** дегидрирование этилбензола; прогнозирующая модель; система предиктивного управления; температурный режим; тепловой эффект; химическая кинетика.

**Аннотация:** Выполнен синтез общей структуры математического обеспечения системы упреждающего управления реакторным блоком производства стирола. Разработаны математическое описание химических превращений и модель теплообменных процессов, протекающих во время первой стадии реакции дегидрирования. На основе вычислительного эксперимента получены и отображены результаты исследования динамики работы первой ступени реактора в виде диаграмм изменения концентрации стирола в зависимости от значений технологических параметров. Полученные численные результаты моделирования позволяют осуществлять оперативную оценку влияния снижения величины температуры смеси по мере прохождения ею каталитической зоны реактора на величину выхода стирола и расчет траектории изменения значений управляющих воздействий до определенного момента времени – горизонта управления.

---

**Постановка задачи**

Химическая промышленность характеризуется высокой энергоемкостью, что выражается в потреблении больших объемов топлива, а также подводимого тепла и электрической энергии. В любом химико-технологическом процессе основным аппаратом является реактор, в котором протекают химические превращения, сопровождающиеся тепло- и массообменными процессами. Реакционные аппараты, как правило, представляют собой сложную теплоэнергетическую систему. Поэтому, одним из основных критериев, по которому необходимо проводить управление химическим реактором, является снижение объемов потребления энергоресурсов без потери качества и количества произведенного продукта.

В связи с этим, для эффективного управления технологическими объектами в первую очередь необходимо создание математического обеспечения автоматизированных систем управления (АСУ) на основе прогнозирующих моделей, учитывающих тепловые эффекты химических реакций и, позволяющих оперативно строить горизонты предсказания динамики изменения величин выходных параметров объекта управления, для расчета соответствующих значений величин управляющих воздействий.

Одним из наиболее энергозатратных химико-технологических процессов является производство стирола методом двухступенчатого гетерогенного каталитического разложения этилбензола, в результате которого происходит отделение молекулы водорода – дегидрирование от исходного сырья и образование как целевого продукта, так и большого количества побочных веществ. Реактор дегидрирования является адиабатическим непрерывного действия с неподвижным слоем катализатора и относится к типу высокотемпературных реакторов, для которого внедрение предиктивной АСУ на базе прогнозирующих моделей – актуальная научно-производственная задача. Это обусловлено отсутствием средств оперативного прогнозирования: величины активности каталитического слоя, изменения значений технологических параметров на протяжении всего периода эксплуатации реактора и, как следствие, количества выделившегося стирола, что делает невозможным выработку управляющих сигналов и построение горизонта управления для предотвращения падения концентрации целевого продукта на выходе из реакторных ступеней.

### **Синтез структуры математического обеспечения системы управления**

Решение поставленной задачи невозможно без комплексного математического описания кинетических закономерностей с учетом каталитической активности, теплового эффекта реакции, а также значений гидродинамических параметров. Поэтому начальной стадией проектирования предиктивной системы управления является синтез математического обеспечения АСУ, основу которого должны составлять математические модели реакторных ступеней дегидрирования, прогнозирующих изменение скоростей химических превращений в зависимости от варьирования технологических параметров процесса на протяжении всего периода эксплуатации реактора:

- математическое описание теплообменных процессов, протекающих в ступенях реакторного блока;
- математические зависимости, описывающие кинетику основных и побочных химических реакций, происходящих в результате дегидрирования этилбензольной шихты;
- модель динамики коксообразования на каталитической поверхности ступеней реактора;
- модель снижения активности каталитической системы в зависимости от изменения температурного режима протекания процесса и скорости образования отложений кокса;
- модели возмущающих воздействий, ошибок измерений и шумов.

Исходя из конструкции реакторного блока и особенностей его эксплуатации, структурно математическая модель строится по модульному принципу [1] и подразделяется на две составляющие, каждая из которых описывает процессы в первой и второй ступенях соответственно, при этом выходные потоки первой части модели являются входными параметрами для второй. Каждая из данных частей, в свою очередь, включает в себя вышеперечисленные модели как составные элементы математического описания теплообменных и химических процессов,

а также механизмов отложения коксовых отложений и падения активности каталитической системы. Структурные связи между этими элементами жесткие, так как основные связующие параметры:

- температура реакционной смеси на входах в ступени реактора;
- величины снижения температуры потока реагентов по длине реакционных зон ступеней реактора.

На основе системного анализа и проведенных исследований [2 – 4] структурная схема математического описания процесса дегидрирования и схема тепловых потоков в первой ступени реакторного блока представлены на рис. 1 и 2 соответственно.

На рисунке 1 даны следующие обозначения:  $l$  – расстояние от входа в реакторную ступень ( $0 < l < l_k$ ), м;  $l_k$  – длина реакторной ступени, м;  $act_0^1, act_0^2$  – активность катализатора в первой и второй ступенях реактора в начале рабочего цикла;  $K_{koks0}^1, K_{koks0}^2$  – концентрация кокса на каталитических слоях в первой и второй ступенях реактора в начале рабочего цикла, %;  $T_{p0}^1, T_{p0}^2$  – температура водяного пара на входах в первую и вторую ступени реактора соответственно, К;  $m_{p0}^1, m_{p0}^2$  – расход водяного пара, подаваемого в смесительную камеру первой ступени и межступенчатый перегреватель второй ступени соответственно, кг/с;  $T_{sh0}^1$  – температура шихты на входе в первую ступень реакторного блока соответственно, К;  $m_{sh}$  – расход шихты на входе в реактор, т/ч;  $G_A^1(0), G_{prod}^1(0)$  – концентрация стирола и побочных продуктов в шихте на входе в первую ступень реакторного блока соответственно, моль/л;  $T_{RZ}^1(l), T_{RZ}^2(l)$  – текущие значения температуры в реакционных зонах первой и второй ступеней реакторного блока, К;  $act^1(l), act^2(l)$  – текущие значения активности катализатора в реакционных зонах первой и второй ступенях реакторного блока;  $K_{koks}^1(l), K_{koks}^2(l)$  – текущие значения концентрации кокса на каталитическом слое первой и второй ступеней реакторного блока, %;  $G_A^1(l), G_A^2(l)$  – текущие значения концентрации стирола в первой и второй ступенях реакторного блока, моль/л;  $G_{prod}^1(l), G_{prod}^2(l)$  – текущие значения суммарной концентрации побочных продуктов по длине реакционной зоны первой и второй ступеней реакторного блока соответственно, моль/л;  $T_{sh}^1(l_k), T_{sh}^2(l_k)$  – температуры шихты на выходах из первой (на входе во вторую ступень) и второй ступеней соответственно, К;  $G_A^1(l_k), G_A^2(l_k)$  – концентрации стирола на выходе из первой (на входе во вторую ступень) и второй ступеней соответственно, моль/л;  $G_{prod}^1(l_k), G_{prod}^2(l_k)$  – суммарные концентрации продуктов на выходе из первой (на входе во вторую ступень) и второй ступеней соответственно, моль/л.

На рисунке 2 приведены обозначения:  $Q_0^{sh}$  – количество теплоты потока этилбензольной шихты на входе в смесительную камеру, Дж;  $Q_0^p$  – количество теплоты потока водяного пара на входе в смесительную камеру, Дж;  $Q_0^{sm}$  – количество теплоты смеси на выходе из смесительной камеры (на входе в ступень

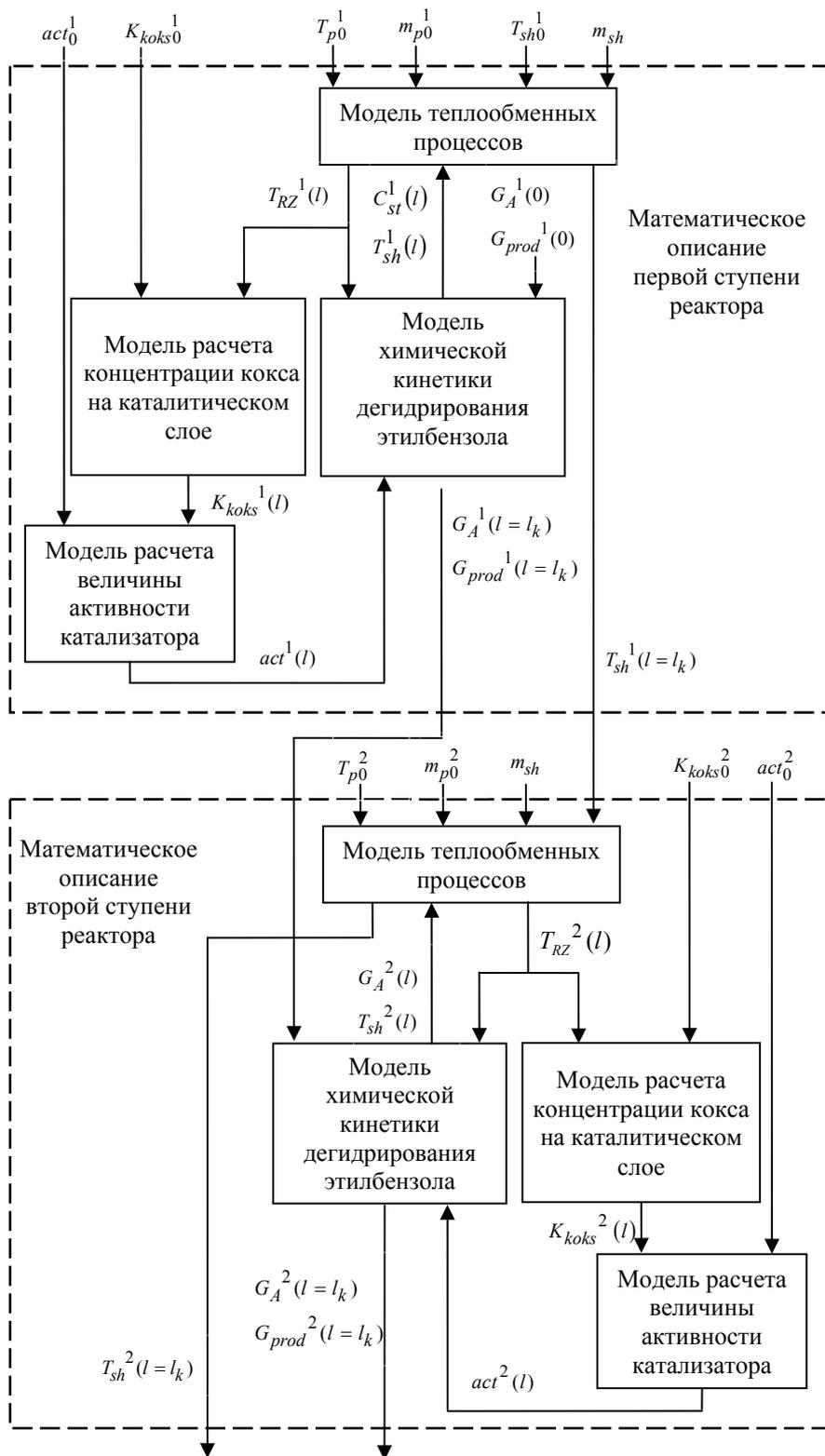
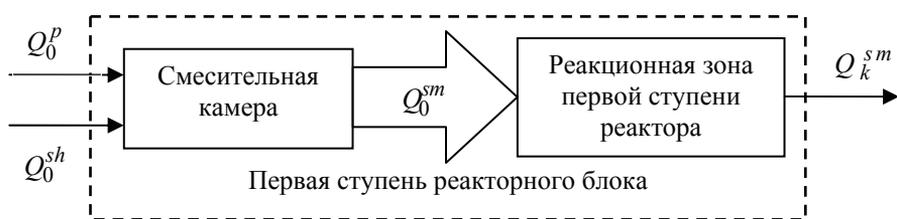


Рис. 1. Структурная схема математического описания реактора производства стирола



**Рис. 2. Структурная схема тепловых потоков в первой ступени реакторного блока производства стирола**

реактора), Дж;  $Q_k^{sm}$  – количество теплоты парэтилбензольной смеси на выходе из реакторной ступени, Дж.

В виду сложности конструкции реактора, условий эксплуатации катализатора и механизма химических реакций, синтез математического описания процесса дегидрирования целесообразно проводить в несколько этапов.

1. Декомпозиция задачи моделирования технологического процесса на последовательность математических подзадач, каждая из которых описывает:

- отдельный физический или совокупность химических процессов в реакционной зоне (теплообмен в первой и второй ступенях реактора, коксообразование и снижение активности каталитического слоя, изменение концентраций основных и побочных компонентов смеси);

- степень влияния шумов, ошибок измерений и возмущений на значения величин управляемых параметров объекта.

2. Выявление структурных и логических связей между составными частями модели технологического процесса.

3. Проведение вычислительных экспериментов и визуализация результатов, посредством которых формируется база знаний, отображающая изменения выходных величин ступеней реактора в зависимости от варьирования одного или нескольких технологических параметров, управляющих и/или возмущающих воздействий.

4. Композиция моделей, описывающих динамику протекания физико-химических процессов реактора в математическое обеспечение АСУ отделения производства стирола, и разработка алгоритма расчета контролируемых и регулируемых параметров ступеней объекта управления на определенном временном интервале функционирования производственной линии.

Для эффективного управления и нахождения оптимальных значений и траекторий изменения технологических параметров функционирования реакторных ступеней необходимо разработать модель, описывающую химическую кинетику процесса, что в конечном итоге позволит выявить степень влияния технологических параметров и состояния каталитической поверхности на скорость основных и побочных реакций.

Выполненные ранее научные работы [2 – 4], не позволяют использовать разработанные в них модели для построения достоверного горизонта предсказания изменения концентраций продуктов химических реакций в динамическом режиме. Приведенные модели [2, 3] могут быть применены только при условии стационарности значений основных технологических параметров реакционного аппарата: расходов этилбензольной шихты и энергоносителей, температуры и активности катализатора по всей длине реакционной зоны. Усовершенствованная версия модели, представленная в [4], позволяет выполнять расчет скоростей химической реакции с учетом падения активности катализатора, но так же как и при использовании других моделей, расчет процесса возможно провести только

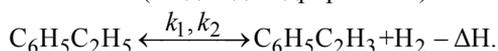
путем нахождения численного решения системы дифференциальных уравнений, описывающей все элементарные реакции (основные и побочные) с предварительной оценкой большого числа значений констант скоростей в условиях неопределенности траекторий изменения концентраций продуктов по длине реакторных ступеней.

### Моделирование кинетики химических реакций распада этилбензола

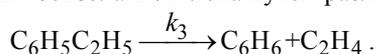
Химические превращения, возникающие при отделении молекул водорода от этилбензола, протекают на поверхности неподвижного слоя катализатора в газовой фазе и относятся к группе гетерогенно-каталитических реакций, кинетика которых в большинстве случаев очень сложна. В рассматриваемом случае это обусловлено конструктивными особенностями реактора, многостадийностью протекания химических реакций, мультикомпонентностью реакционной смеси и использованием каталитических систем. За время прохождения шихты через реакторные ступени в реакционном объеме протекает множество реакций различных видов (обратимые, последовательные, параллельные, мономолекулярные и бимолекулярные), в результате которых происходит выделение таких компонентов, как бензол, толуол, этилен, метан, водород, углерод, углеродсодержащие газы и образование целевого продукта – стирола.

Анализ последовательности химических превращений позволил сделать вывод, что образование таких продуктов, как водород, углерод и оксиды углерода, выделяющихся в результате побочных реакций разложения метана и его конверсии водяным паром, не оказывают существенного влияния на динамику протекания процесса и концентрацию целевого продукта на выходе из реакторных ступеней ввиду малого содержания данного вещества (метана) в контактном газе. Таким образом, для разработки модели достаточно рассмотреть реакции, в процессе которых происходит выделение стирола, бензола, этилена, толуола и метана.

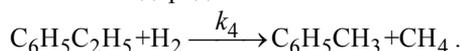
1. Стадия образования стирола и водорода путем отщепления молекул водорода от этилбензольной шихты (стадия дегидрирования)



2. Стадия образования бензола и этилена путем разложения этилбензола



3. Реакция образования толуола и метана в результате протекания реакции взаимодействия этилбензола и водорода



Скорости данных химических превращений определяются следующими зависимостями:

–  $r_1 = k_1 G_A$  – скорость образования стирола и водорода;

–  $r_2 = k_2 G_B G_C$  – скорость обратной реакции (взаимодействие стирола и водорода);

–  $r_3 = k_3 G_A$  – скорость образования бензола и этилена;

–  $r_4 = k_4 G_A G_C$  – скорость образования толуола и метана,

где  $r_i$ ,  $i = 1, \dots, 4$  – скорость  $i$ -й реакции, моль/(л·с);  $\Delta H$  – тепловой эффект реакции, Дж/кг;  $G_A$ ,  $G_B$ ,  $G_C$  – концентрации стирола, этилбензола и водорода соответственно, моль/л;  $k_1$  – константа скорости образования стирола и водорода (прямой стадии реакции дегидрирования),  $\text{с}^{-1}$ ;  $k_2$  – константа скорости обратной стадии дегидрирования, л/(моль·с);  $k_3$  – константа скорости образования бензола и этилена,  $\text{с}^{-1}$ ;  $k_4$  – константа скорости образования толуола и метана, л/(моль·с).

В соответствии с выделенными стадиями процесса математическая модель представляется в виде системы дифференциальных уравнений, описывающей скорости изменения концентраций компонентов смеси по длине реакторных ступеней:

$$\left\{ \begin{array}{l} \upsilon \frac{dG_A}{dl} = k_1 G_B - k_2 G_A G_B; \\ \upsilon \frac{dG_B}{dl} = k_2 G_A G_B - k_1 G_B - k_3 G_B - k_4 G_B G_C; \\ \frac{dG_C}{dl} = k_1 G_B - k_2 G_A G_B - k_4 G_B G_C; \\ \upsilon \frac{dG_D}{dl} = k_3 G_B; \\ \upsilon \frac{dG_E}{dl} = k_3 G_B; \\ \upsilon \frac{dG_F}{dl} = k_4 G_B G_C; \\ \upsilon \frac{dG_g}{dl} = k_4 G_B G_C; \\ G_A|_{l=0} = G_C|_{l=0} = G_E|_{l=0} = G_g|_{l=0} = 0; \\ G_B|_{l=0} = 52,266, G_D|_{l=0} = 0,071; \\ G_F|_{l=0} = 0,060, \end{array} \right. \quad (1)$$

где  $\upsilon$  – линейная скорость потока, м/с;  $G_D$ ,  $G_E$ ,  $G_F$ ,  $G_g$ , – концентрации бензола, этилена, толуола и метана соответственно, моль/л.

### **Моделирование теплообменных процессов в первой ступени реакторного блока**

Реакция дегидрирования сопровождается эндотермическим тепловым эффектом. Количество теплоты, поглощаемое при выделении 1 кг стирола, составляет 100...130 кДж [5, 6].

Реактор производства стирола представляет собой два последовательно соединенных аппарата шахтного типа, вдоль стенок реакционных зон которых загружен неподвижный слой катализатора. Каждый из аппаратов реакторного блока имеет свои конструктивные особенности, учитывая которые и принимая во внимание процессы, протекающие в них, разработку математического описания теплообменных процессов необходимо осуществлять отдельно для каждой из ступеней.

Рассмотрим первую ступень. Данный агрегат снабжен смесительной камерой, предназначенной для образования парэтилбензольной смеси из потоков греющего пара и шихты (см. рис. 2). Задача исследования динамики функционирования ступени решается посредством расчета концентрации целевого продукта на основе модели химической кинетики (1) с использованием уравнений теплового баланса и учетом потерь тепла реакционного потока по длине ступени для диапазона нагрузки по сырью в 20,00...31,75 т/ч. Принимая во внимание, что используемый реакционный аппарат является адиабатическим и с учетом теплового эффекта реакции образования стирола, уравнения теплового баланса составных элементов первой ступени выглядят следующим образом.

*Статическая форма.*

Уравнение теплового баланса смесительной камеры:

$$Q_0^P + Q_0^{sh} = Q_0^{sm}; \quad (2)$$

$$C_0^{sh} m_0^{sh} T_0^{sh} + C_0^P m_0^P T_0^P = (C_0^{sh} m_0^{sh} + C_0^P m_0^P) T_0^{sm}. \quad (3)$$

Уравнение теплового баланса реакционной зоны:

$$Q_0^{sm} = Q_k^{sm} + Q^r + Q^{pot}; \quad (4)$$

$$\left( C_0^{sh} m_0^{sh} + c_0^P m_0^P \right) T_0^{sm} - \Delta H G_A S l_k M_A = \left( C_{l_k}^{sh} m_0^{sh} + c_{l_k}^P m_0^P \right) T_{l_k}^{sm}, \quad (5)$$

где  $Q^r$  – количество теплоты, поглощаемое при образовании стирола за время прохода потока реагентов через реакторную ступень, Дж;  $Q^{pot} = 0$  – количество теплоты, поглощаемое при теплообмене с окружающей средой, Дж;  $C_0^{sh}$  – удельная теплоемкость шихты на входе в реакционную зону, Дж/(кг·К);  $m_0^{sh}$  – расход шихты, кг/с;  $T_0^{sh}$  – температура шихты на входе в смесительную камеру, К;  $c_0^P$  – удельная теплоемкость водяного пара на входе в реакционную зону, Дж/(кг·К);  $m_0^P$  – расход водяного пара, кг/с;  $T_0^P$  – температура пара на входе в смесительную камеру, К;  $T_0^{sm}$ ,  $T_{l_k}^{sm}$  – температуры парозтилбензольной смеси на выходе из смесительной камеры и реакторной ступени соответственно, К;  $\Delta H = 1130436$  – количество энергии, затраченной на образование одного килограмма стирола, Дж/кг;  $G_A$  – концентрация выделившегося стирола, моль/л;  $S$  – площадь сечения реактора, м<sup>2</sup>;  $l_k$  – длина реакторной ступени, м;  $M_A$  – молярная масса стирола, кг/моль;  $C_{l_k}^{sh}$ ,  $c_{l_k}^P$  – удельные теплоемкости шихты и водяного пара на выходе из реакционной зоны соответственно, Дж/(кг·К).

Решения уравнений (3) и (5) относительно температуры парозтилбензольной смеси, поступающей в зону реакции из смесительной камеры, и температуры контактного газа на выходе имеют вид:

$$T_0^{sm} = \frac{C_0^{sh} m_0^{sh} T_0^{sh} + c_0^P m_0^P T_0^P}{C_0^{sh} m_0^{sh} + c_0^P m_0^P}; \quad (6)$$

$$T_k^{sm} = \frac{\left( C_0^{sh} m_0^{sh} + c_0^P m_0^P \right) T_0^{sm} - \Delta H G_A S l_k M_A}{C_{l_k}^{sh} m_0^{sh} + c_{l_k}^P m_0^P}. \quad (7)$$

*Динамическая форма.*

Исходя из вышеизложенного, изменение температуры реакционной смеси за время прохождения ею первой ступени описывается дифференциальным уравнением

$$\frac{dT}{dl} = - \frac{\Delta H G_A(l) S l M_A}{C^{sh}(l) m_0^{sh} + c^P(l) m_0^P}, \quad (8)$$

где  $G_A(l)$  – текущее значение концентрации выделившегося стирола, моль/л;  $C^{sh}(l)$ ,  $c^P(l)$  – текущие значения теплоемкостей шихты и водяного пара соответственно, Дж/(кг·К).

## Исследование динамики работы первой реакторной ступени

В качестве основного допущения при проведении вычислительного эксперимента на основе модели процесса дегидрирования при различных значениях расхода сырья – этилбензольной шихты, принято постоянство величины активности каталитического слоя в произвольной точке реакторного блока. В процессе выполнения расчетов объектом моделирования является первая ступень реакторного блока со следующими конструктивными параметрами: диаметр 4,5 м, высота 7,4 м; толщина слоя катализатора 0,95 м; расход этилбензольной шихты 20,00...31,50 т/ч; количество водяного пара 3 : 1 по отношению к расходу шихты; температура парэтилбензольной смеси на входе в реактор 560 °С.

Алгоритм расчета количества произведенного стирола на основе предложенных моделей (1) – (8) заключается в выполнении следующей последовательности математических операций:

1) расчет концентрации компонентов этилбензольной шихты на входе в смесительную камеру первой ступени:

$$m_0^A = x_0^A m^{sh}; \quad n_0^A = \frac{m_0^A}{M^A}; \quad G_0^A = \frac{n_0^A}{Sl};$$

$$m_0^B = x_0^B m^{sh}; \quad n_0^B = \frac{m_0^B}{M^B}; \quad G_0^B = \frac{n_0^B}{Sl};$$

$$m_0^C = x_0^C m^{sh}; \quad n_0^C = \frac{m_0^C}{M^C}; \quad G_0^C = \frac{n_0^C}{Sl};$$

$$m_0^D = x_0^D m^{sh}; \quad n_0^D = \frac{m_0^D}{M^D}; \quad G_0^D = \frac{n_0^D}{Sl};$$

$$m_0^E = x_0^E m^{sh}; \quad n_0^E = \frac{m_0^E}{M^E}; \quad G_0^E = \frac{n_0^E}{Sl};$$

$$m_0^F = x_0^F m^{sh}; \quad n_0^F = \frac{m_0^F}{M^F}; \quad G_0^F = \frac{n_0^F}{Sl};$$

$$m_0^G = x_0^G m^{sh}; \quad n_0^G = \frac{m_0^G}{M^G}; \quad G_0^g = \frac{n_0^G}{Sl};$$

$$m^P = 3,5 m^{sh},$$

где  $m^{sh}$ ,  $m^P$  – расход шихты и водяного пара соответственно, кг/с;  $x_0^A$ ,  $x_0^B$ ,  $x_0^C$ ,  $x_0^D$ ,  $x_0^E$ ,  $x_0^F$ ,  $x_0^G$  – доли соответственно стирола, этилбензола, водорода, бензола, этилена, толуола и метана в шихте на входе в смесительную камеру;  $m_0^A$ ,  $m_0^B$ ,  $m_0^C$ ,  $m_0^D$ ,  $m_0^E$ ,  $m_0^F$ ,  $m_0^G$  – расход соответственно стирола, этилбензола, водорода, бензола, этилена, толуола и метана на входе в смесительную камеру, кг/с;  $n_0^A$ ,  $n_0^B$ ,  $n_0^C$ ,  $n_0^D$ ,  $n_0^E$ ,  $n_0^F$ ,  $n_0^g$  – мольный расход соответственно стирола, этилбензола, водорода, бензола, этилена, толуола и метана на входе в смесительную камеру, моль/с;  $M^A$ ,  $M^B$ ,  $M^C$ ,  $M^D$ ,  $M^E$ ,  $M^F$ ,  $M^G$  – молярные массы соответственно

стирола, этилбензола, водорода, бензола, этилена, толуола и метана, кг/моль;  $G_0^A, G_0^B, G_0^C, G_0^D, G_0^E, G_0^F, G_0^G$  – величины концентраций соответственно стирола, этилбензола, водорода, бензола, этилена, толуола и метана на входе в смесительную камеру, моль/л;

2) расчет значений теплоемкостей компонентов шихты на входе в смесительную камеру:

$$c_0^A = \frac{a^A T_0^{sh^3} + b^A T_0^{sh^2} + c^A T_0^{sh} + d^A}{M^A}; \quad c_0^B = \frac{a^B T_0^{sh^3} + b^B T_0^{sh^2} + c^B T_0^{sh} + d^B}{M^B};$$

$$c_0^C = \frac{a^C T_0^{sh^3} + b^C T_0^{sh^2} + c^C T_0^{sh} + d^C}{M^C}; \quad c_0^E = \frac{a^E T_0^{sh^3} + b^E T_0^{sh^2} + c^E T_0^{sh} + d^E}{M^E};$$

$$c_0^F = \frac{a^F T_0^{sh^3} + b^F T_0^{sh^2} + c^F T_0^{sh} + d^F}{M^F}; \quad c_0^G = \frac{a^G T_0^{sh^3} + b^G T_0^{sh^2} + c^G T_0^{sh} + d^G}{M^G};$$

$$c_0^P = a^P T_0^{p^2} + b^P T_0^p + c^P,$$

где  $a^A = 0,0000001036$ ;  $b^A = -0,0004146717$ ;  $c^A = 0,6254464646$ ;  $d^A = -30,1606060605$ ;  
 $a^B = 0,0000000850$ ;  $b^B = -0,0004010324$ ;  $c^B = 0,6736931565$ ;  $d^B = -47,2540720961$ ;  
 $a^C = 0,0000000010$ ;  $b^C = -0,0000006666$ ;  $c^C = 0,0012798929$ ;  $d^C = 28,5979567189$ ;  
 $a^D = 0,0000000628$ ;  $b^D = -0,0002701486$ ;  $c^D = 0,4429515047$ ;  $d^D = -27,0555339901$ ;  
 $a^E = 0,0000000272$ ;  $b^E = -0,0001126843$ ;  $c^E = 0,1841492929$ ;  $d^E = -4,2521212121$ ;  
 $a^F = 0,0000000752$ ;  $b^F = -0,0003310446$ ;  $c^F = 0,5507007835$ ;  $d^F = -34,7286267829$ ;  
 $a^G = -0,0000000084$ ;  $b^G = 0,0000039757$ ;  $c^G = 0,0590733890$ ;  $d^G = 17,4810686085$ ;  
 $a^P = -0,00013547$ ;  $b^P = 0,93538188$ ;  $c^P = 1500,3648097$ ;

здесь  $c_0^A, c_0^B, c_0^C, c_0^D, c_0^E, c_0^F, c_0^G, c_0^P$  – удельные теплоемкости соответственно стирола, этилбензола, водорода, бензола, этилена, толуола, метана и водяного пара на входе в смесительную камеру, Дж/(кг·К);

3) определение общей теплоемкости шихты на входе в смесительную камеру

$$c_0^{sh} = m_0^A c_0^A + m_0^B c_0^B + m_0^C c_0^C + m_0^D c_0^D + m_0^E c_0^E + m_0^F c_0^F + m_0^G c_0^G;$$

4) расчет температуры парозтилбензольной смеси на выходе из смесительной камеры (на входе в реакционную зону) по формуле (6);

5) расчет системы уравнений (1);

6) определение величины изменения температуры реакционной смеси по длине реакторной ступени по формуле (8);

7) расчет значений теплоемкости компонентов шихты с учетом снижения температуры смеси на дифференциальном участке реакторной ступени:

$$c^A(l) = \frac{a^A T(l)^3 + b^A T(l)^2 + c^A T(l) + d^A}{M^A};$$

$$c^B(l) = \frac{a^B T(l)^3 + b^B T(l)^2 + c^B T(l) + d^B}{M^B};$$

$$c^C(l) = \frac{a^C T(l)^3 + b^C T(l)^2 + c^C T(l) + d^C}{M^C};$$

$$c^D(l) = \frac{a^D T(l)^3 + b^D T(l)^2 + c^D T(l) + d^D}{M^D};$$

$$c^E(l) = \frac{a^E T(l)^3 + b^E T(l)^2 + c^E T(l) + d^E}{M^E};$$

$$c^F(l) = \frac{a^F T(l)^3 + b^F T(l)^2 + c^F T(l) + d^F}{M^F};$$

$$c^G(l) = \frac{a^G T(l)^3 + b^G T(l)^2 + c^G T(l) + d^G}{M^G};$$

$$c^P(l) = a^P T(l)^2 + b^P T(l) + c^P,$$

где  $T(l)$  – текущее значение температуры в реакционной зоне, К;

8) определение текущего значения теплоемкости этилбензолной шихты с учетом снижения температуры смеси

$$c^{sh}(l) = m^A(l)c^A(l) + m^B(l)c^B(l) + m^C(l)c^C(l) + m^D(l)c^D(l) + m^E(l)c^E(l) + m^F(l)c^F(l) + m^G(l)c^G(l);$$

9) перерасчет констант скоростей химических реакций:

$$k_1(l) = k_{1,0} e^{\frac{-E_a}{RT(l)}};$$

$$k_2(l) = k_{2,0} e^{\frac{-E_a}{RT(l)}};$$

$$k_3(l) = k_{3,0} e^{\frac{-E_a}{RT(l)}};$$

$$k_4(l) = k_{4,0} e^{\frac{-E_a}{RT(l)}};$$

где  $k_i(l)$  – скорость образования  $i$ -го компонента;  $k_{i,0}$  – предэкспоненциальный множитель;  $E_a = 152$  кДж/моль – энергия активации дегидрирования этилбензола, Дж/моль [7];  $R$  – универсальная газовая постоянная, Дж/(моль·К);  $T(l)$  – температура реактора, К;

10) пункты 5 – 9 алгоритма повторяются циклически для  $N$  шагов, где  $N = l_k/\Delta l$ ,  $\Delta l$  – величина шага по длине реакторной ступени, м.

Расчет процесса дегидрирования проводится для диапазона значений расхода этилбензола. При этом следует отметить, что решение приведенной системы уравнений (1) относится к прямой кинетической задаче. Предварительно, с помощью численных методов оптимизации, выполнена оценка предэкспоненциальных множителей уравнений расчета констант скоростей химических реакций:  $k_{1,0} = 0,224$ ;  $k_{2,0} = 0,0016$ ;  $k_{3,0} = 0,016$ ;  $k_{4,0} = 0,0016$ .

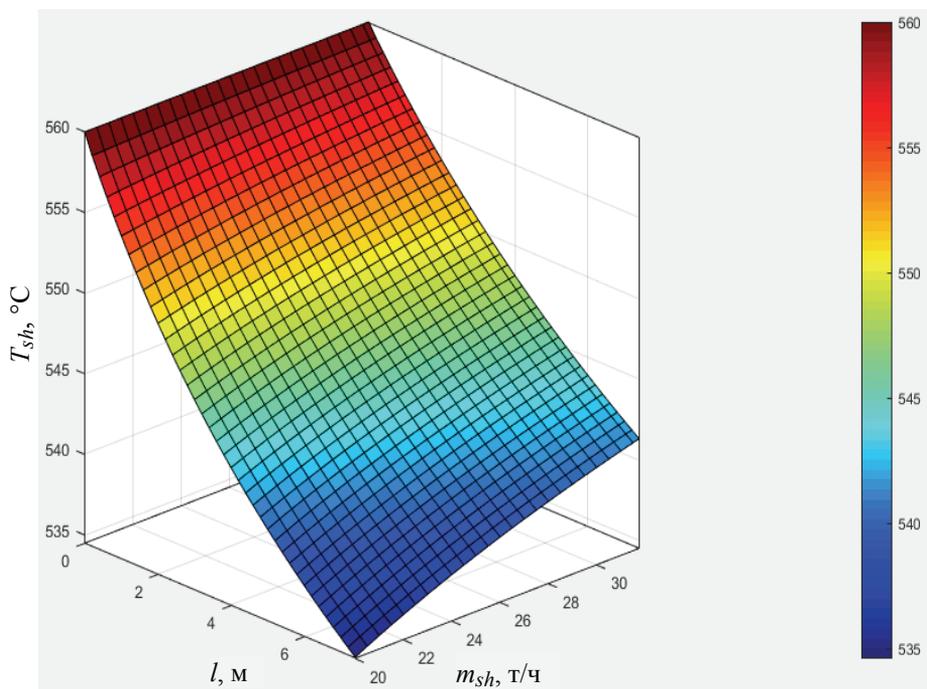
## Результаты и выводы

Результаты математических исследований процессов в первой ступени реакторного блока, выполненные при различных гидродинамических параметрах и температурных режимах (изотермическом и неизотермическом), представлены в виде числовых значений в табл. 1 и трехмерных диаграмм на рис. 3, 4.

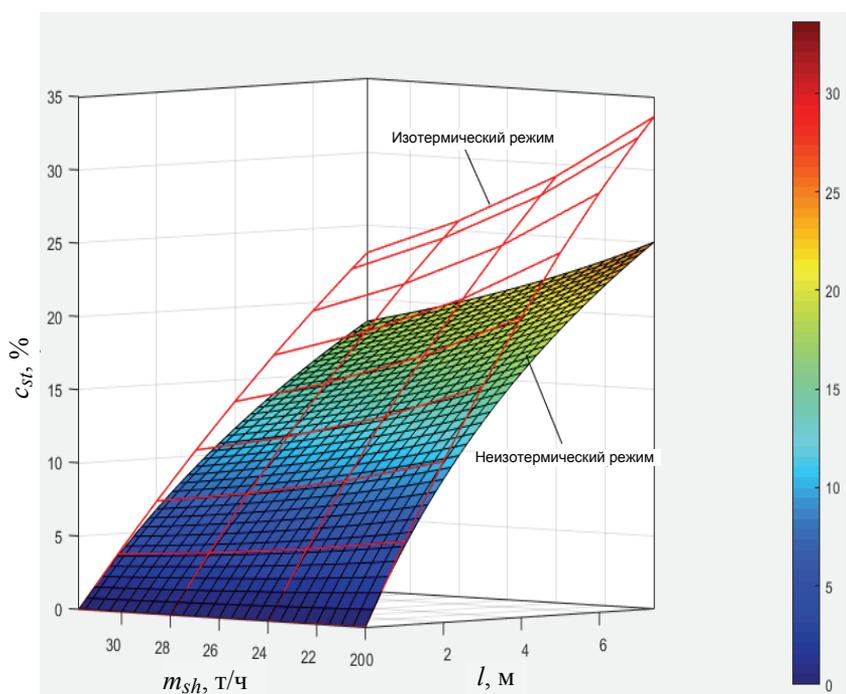
Таблица 1

### Изменение температуры потока парэтилбензольной смеси и концентрации стирола по длине первой реакторной ступени при различных величинах расхода этилбензольной шихты

Расход шихты, т/ч	Длина первой ступени реактора, м	Время контакта реакционной смеси с катализатором, с	Режим работы реактора		
			неизотермический		изотермический при $T = 560\text{ }^{\circ}\text{C}$
			температура реакционного потока, $^{\circ}\text{C}$	концентрация стирола на выходе из первой ступени, %	
20		0	560	0	
	1	0,265	554	5,33	5,67
	2	0,531	549	9,68	10,98
	3	0,797	545	13,34	15,92
	4	1,062	542	16,47	20,50
	5	1,328	539	19,21	24,75
	6	1,593	536	21,63	28,67
	7,4	1,859	534	23,79	32,28
24		0	560	0	
	1	0,221	555	4,51	4,75
	2	0,442	551	8,30	9,24
	3	0,664	547	11,55	13,47
	4	0,885	544	14,39	17,45
	5	1,106	541	16,90	21,18
	6	1,327	539	19,15	24,66
	7,4	1,548	537	21,17	27,92
28		0	560	0	
	1	0,190	556	3,90	4,08
	2	0,379	552	7,26	7,97
	3	0,569	549	10,19	11,67
	4	0,758	546	12,78	15,18
	5	0,948	543	15,10	18,50
	6	1,137	541	17,20	21,63
	7,4	1,327	539	19,10	24,58
31,75		0	560	0	
	1	0,167	556	3,47	3,61
	2	0,335	553	6,50	7,07
	3	0,502	550	9,18	10,38
	4	0,669	547	11,58	13,53
	5	0,836	545	13,74	16,54
	6	1,004	543	15,70	19,39
	7,4	1,171	541	17,50	22,10
	1,238	540	18,18	23,15	



**Рис. 3.** Диаграмма снижения температуры реакционной смеси по длине реакционной зоны первой ступени реактора при различных значениях расхода шихты



**Рис. 4.** Диаграмма изменения концентрации стирола по длине первой ступени реактора от расхода этилбензольной шихты при изотермическом и неизотермическом режимах

## Заключение

Представлена структурная схема синтеза математического обеспечения и решение основных задач моделирования процесса производства стирола как объекта управления:

– уточнение модели кинетики химических превращений для расчета концентраций компонентов реакционной смеси, соответствующих данным промышленной эксплуатации в зависимости от нагрузки реактора по сырью и температурного режима;

– составление уравнений теплообменных процессов, происходящих в первой ступени реактора при прохождении шихты через каталитическую зону.

В результате проведенных исследований получены поверхности, соответствующие изотермическому и неизотермическому режимам работы аппарата первой стадии дегидрирования. Установлено, что концентрация стирола в конечной точке реакционной зоны и скорость ее изменения снижается по мере увеличения расхода сырья, проходящего через реакторную ступень. Приведенные в табл. 1 численные значения позволяют провести оценку степени влияния фактора снижения температуры смеси за время контакта с каталитической системой в соответствии с гидродинамическим режимом функционирования объекта. Таким образом, полученные траектории изменения концентрации целевого продукта являются основой для оперативной оценки приращения значений температуры парэтилбензольной смеси, поступающей из смесительной камеры, что целесообразно обеспечить с помощью предиктивной системы программного управления расходами энергоносителей (греющего пара и топливного газа) в соответствии с нагрузкой реактора по сырью.

### Список литературы

1. Подвальный, С. Л. Модульная структура системы многоальтернативного моделирования процессов полимеризации / С. Л. Подвальный, А. В. Барабанов // Вестн. Воронежского гос. техн. ун-та. – 2013. – Т. 9, № 5-1. – С. 41 – 43.
2. Островский, Г. М. Моделирование сложных химико-технологических схем / Г. М. Островский, Ю. М. Волин. – М. : Химия, 1975. – 312 с.
3. Разработка математической модели кинетики процесса дегидрирования этилбензола в двухступенчатом адиабатическом реакторе непрерывного действия / В. К. Битюков [и др.] // Вестн. Воронежского гос. ун-та инженерных технологий. – 2015. – № 2 (64). – С. 55 – 60.
4. Моделирование кинетики процесса дегидрирования этилбензола с учетом дезактивации каталитического слоя реактора / В. К. Битюков [и др.] // Вестн. Воронежского гос. ун-та инженерных технологий. – 2017. – Т. 79, №1 (71). – С. 73 – 80. doi: 10.20914/2310-1202-2017-1-73-80
5. Кирпичников, П. А. Альбом технологических схем основных производств промышленности синтетического каучука : учеб. пособие для вузов / П. А. Кирпичников, В. В. Береснев, Л. М. Попова. – 2-е изд., перераб. – Л. : Химия, 1986. – 224 с.
6. Пат. 2214992 Российская Федерация, МПК С07С 15/46 (2000.01), С07С 5/333 (2000.01), В01J 23/78 (2000.01), В01J 23/94 (2000.01). Способ дегидрирования этилбензола до стирола / Р. Ецци, Д. Санфилиппо ; заявитель и патентообладатель С. П. А. Снампроджетти – № 2002107129/04 ; заявл. 19.09.2000 ; опубл. 27.10.2003, Бюл. № 30. – 17 с.
7. Тимофеев, В. С. Принципы технологии основного органического и нефтехимического синтеза : учеб. пособие для вузов / В. С. Тимофеев, Л. А. Серафимов. – 2-е изд. – М. : Высш. шк., 2003. – 536 с.

## Synthesis of the Structure of a Predictive Model of Control System for Ethylbenzene Dehydrogenation Reactor

S. G. Tikhomirov<sup>1</sup>, S. L. Podvalnyy<sup>2</sup>, A. P. Popov<sup>1</sup>, O. G. Neizvestnyy<sup>2</sup>

*Department of Information and Control Systems, Voronezh State University of Engineering Technologies (1), Voronezh, Russia; aleksej\_p\_91@mail.ru;*

*Department of Automated and Computing Systems, Voronezh State Technical University (2), Voronezh, Russia*

**Keywords:** ethylbenzene dehydrogenation; predictive model; predictive control system; temperature conditions; thermal effect; chemical kinetics.

**Abstract:** The synthesis of the general structure of the mathematical support of the proactive control system of the phenyl ethylene production reactor unit was carried out. A mathematical description of chemical transformations and a model of heat exchange processes occurring during the first stage of the dehydration reaction were developed. Using the computational experiment, the results of the study of the dynamics of the first stage of the reactor in the form of diagrams of changes in phenyl ethylene concentration depending on the values of the process parameters were obtained and described. The numerical simulation results made it possible to assess quickly the effect of reducing the temperature of the mixture – as it passed through the catalytic zone of the reactor – on the phenyl ethylene output, and to calculate the trajectory of changes in the values of control actions up to a certain point in time – the control horizon.

### References

1. Podval'nyy S.L., Barabanov A.V. [The modular structure of the system of multi-alternative modeling of polymerization processes], *Vestnik Voronezhskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta* [Bulletin of the Voronezh State Technical University], 2013, vol. 9, no. 5-1, pp. 41-43. (In Russ., abstract in Eng.)
2. Ostrovskiy G.M., Volin Yu.M. *Modelirovaniye slozhnykh khimiko-tekhnologicheskikh skhem* [Modeling of complex chemical-technological schemes], Moscow: Khimiya, 1975, 312 p. (In Russ.)
3. Bityukov V.K., Zhatova I.A., Alekseyev M.V., Popov A.P. [Development of a mathematical model of the kinetics of ethylbenzene dehydrogenation in a two-stage adiabatic continuous reactor], *Vestnik Voronezhskogo gosudarstvennogo universiteta inzhenernykh tekhnologiy* [Bulletin of the Voronezh State University of Engineering Technology], 2015, no. 2 (64), pp. 55-60. (In Russ., abstract in Eng.)
4. Bityukov V.K., Popov A.P., Tikhomirov S.G., Neizvestnyy O.G. [Simulation of the kinetics of the process of ethylbenzene dehydrogenation taking into account deactivation of the catalytic layer of the reactor], *Vestnik Voronezhskogo gosudarstvennogo universiteta inzhenernykh tekhnologiy* [Bulletin of the Voronezh State University of Engineering Technology], 2017, vol. 79, no.1 (71), pp. 73-80, doi: 10.20914/2310-1202-2017-1-73-80 (In Russ., abstract in Eng.)
5. Kirpichnikov P.A., Beresnev V.V., Popova L.M. *Al'bom tekhnologicheskikh skhem osnovnykh proizvodstv promyshlennosti sinteticheskogo kauchuka: ucheb. posobiye dlya vuzov* [Album of technological schemes of the main production of the synthetic rubber industry: studies. manual for universities], Leningrad: Khimiya, 1986, 224 p. (In Russ.)
6. Yetsti R, Sanfilippo D. *Sposob degidrirovaniya etilbenzola do stirola* [The way dehydrogenation of ethylbenzene to styrene], Russian Federation, 2003, Pat. 2214992 (In Russ.)

7. Timofeyev V.S., Serafimov L.A. *Printsipy tekhnologii osnovnogo organicheskogo i neftekhimicheskogo sinteza: ucheb. posobiye dlya vuzov* [Principles of Technology for Basic Organic and Petrochemical Synthesis: studies. manual for universities], Moscow: Vysshaya shkola, 2003, 536 p. (In Russ.)

---

### **Synthese der Struktur des Vorhersagesteuerungssystems des Ethylbenzol-Dehydrierungsreaktors**

**Zusammenfassung:** Es ist die Synthese der allgemeinen Struktur der mathematischen Unterstützung des proaktiven Kontrollsystems der Styrol-Produktionsreaktoreinheit erfüllt. Eine mathematische Beschreibung chemischer Umwandlungen und ein Modell von Wärmeaustauschprozessen, die während der ersten Phase der Dehydrierungsreaktion auftreten, sind entwickelt. Basierend auf dem Rechenversuch sind die Ergebnisse der Untersuchung der Dynamik der ersten Stufe des Reaktors in Form von Diagrammen der Änderungen der Konzentration des Styrols in Abhängigkeit von den Werten der technologischen Parameter erhalten und angezeigt. Die erhaltenen numerischen Simulationsergebnisse ermöglichen es, die Auswirkung der Verringerung der Temperatur des Gemisches beim Durchgang durch die katalytische Zone des Reaktors bis zum Ausstoß des Styrols schnell einzuschätzen und die Flugbahn der Änderungen der Werte der Steueraktionen bis zu einem bestimmten Zeitpunkt - dem Steuerhorizont – zu berechnen.

---

### **Synthèse de la structure du modèle prédictif du système de la gestion du réacteur de la déshydrogénation de l'éthylène-benzène**

**Résumé:** Est réalisée une synthèse de la structure générale de l'assurance mathématique du système de commande proactive de l'unité de réacteur de la production de styrène. Sont mis au point la description mathématique des transformations chimiques et le modèle des processus d'échange de chaleur au cours de la première phase de déshydrogénation. A la base de l'expérience de calcul, sont obtenus et affichés les résultats de l'étude de la dynamique de la première étape de la réaction sous la forme des diagrammes de la variation de la concentration de styrène en fonction des valeurs des paramètres technologiques. Les résultats numériques de la modélisation permettent d'évaluer rapidement l'effet de la diminution de la température du mélange lors du passage de la zone catalytique du réacteur sur la grandeur de la sortie du styrène et le calcule la trajectoire de la variation des valeurs gérant la commande jusqu'à un certain moment du temps – l'horizon de commande.

---

**Авторы:** *Тихомиров Сергей Германович* – доктор технических наук, профессор кафедры информационных и управляющих систем, ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет инженерных технологий»; *Подвальный Семен Леонидович* – доктор технических наук, профессор кафедры автоматизированных и вычислительных систем, ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет»; *Попов Алексей Петрович* – кандидат технических наук, старший преподаватель кафедры информационных и управляющих систем, ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет инженерных технологий»; *Неизвестный Олег Геннадьевич* – аспирант кафедры автоматизированных и вычислительных систем, ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет», г. Воронеж, Россия.

**Рецензент:** *Карпушкин Сергей Викторович* – доктор технических наук, профессор кафедры «Компьютерно-интегрированные системы в машиностроении», ФГБОУ ВО «ТГТУ», г. Тамбов, Россия.