

А.В. Федоров, А.Е. Петров, А.М. Алешков  
(Академия Государственной противопожарной службы МЧС;  
e-mail: info@academygps.ru)

## СЕТЕВАЯ МОДЕЛЬ ПРОЦЕССА ПОЛИМЕРИЗАЦИИ

**Аннотация.** В статье приводятся результаты исследования предаварийных режимов функционирования технологического процесса полимеризации. Предложены методы математического моделирования сложных потенциально опасных объектов нефтехимии и алгоритмы расчётов динамического изменения параметров процессов при изменении структуры связей элементов.

**Ключевые слова:** автоматизированная система управления, двойственные сети, математические методы моделирования, методы расчёта параметров.

A.V. Fedorov, A.E. Petrov, A.M. Aleshkov

## NETWORK MODEL OF THE PROCESS OF POLYMERIZATION

**Abstract.** In clause results of research of emergency operation of functioning of technological process of polymerization are resulted. Methods of mathematical modelling of complex potentially dangerous objects of petrochemistry and algorithms of calculations of dynamic change of parameters of processes are offered at change of structure of communications of elements.

**Key words:** automated managerial system, twofold networks, mathematical methods of modeling, methods of the calculation parameter.

Статья поступила в редакцию Интернет-журнала 13 июля 2010 г.

Рассмотрим потоки вещества и тепловой энергии в потенциально опасной технологической установке полимеризации, которые оказывают влияние на управляемость и безопасность процесса. Схема этих потоков составляет структуру сетевой модели установки. Для этого выделим основные открытые и замкнутые потоки, которые определяют структурные характеристики, влияющие на обеспечение безопасности процесса. Независимые переменные в сети открытых потоков определяет базис разомкнутых путей в структуре сетевой модели. Независимые переменные в сети замкнутых потоков определяет базис замкнутых путей (контуров) в структуре сетевой модели. Этим базисам соответствуют ортогональные матрицы преобразования путей.

Воздействиями являются давление, напор насосов; напряжение источников электрической энергии; температура, химический потенциал. Откликами являются поток массы (жидкости или пара), электрический ток, поток тепловой энергии, скорость химической реакции. Сетевая модель предназначена для анализа изменения теплового режима и давления, как наиболее важных факторов с точки зрения возникновения аварийных ситуаций. Воздействием в замкнутых путях является давление, откликом – поток жидкости. Мощность характеризует поток энергии. Уравнение поведения потока жидкости имеет вид, аналогичный закону Ома для цепи.

**Технологическая схема производства.** На рис. 1. показана установка полимеризации, на которой схематически представлены основные компоненты данного процесса и направления взаимодействия материальных и тепловых потоков в установке. Стрелки показывают направления движения потоков массы и тепла между элементами установки. Процесс полимеризации осуществляется в петлевом реакторе. Тепловой баланс связан с материальным балансом, который определяется подачей сырья, катализатора и отводом продуктов полимеризации и побочных продуктов из установки.

Пропилен поступает в нижнюю часть реактора-полимеризатора 1 (рис. 1). Туда же подают инертный растворитель (обычно бензин) и катализатор. Необходимая степень перемешивания реакционной массы обеспечивается механической мешалкой и барботажом мономера через жидкую фазу. В результате реакции полимеризации получают полипропилен. Молекулярная масса полимера определяется расходом специальной добавки – регулятора молекулярной массы, в качестве которого, как правило, используют водород. Для отвода тепла, выделяющегося при реакции, в рубашку реактора подают хладонотеплоноситель, роль которого может играть сам исходный мономер.

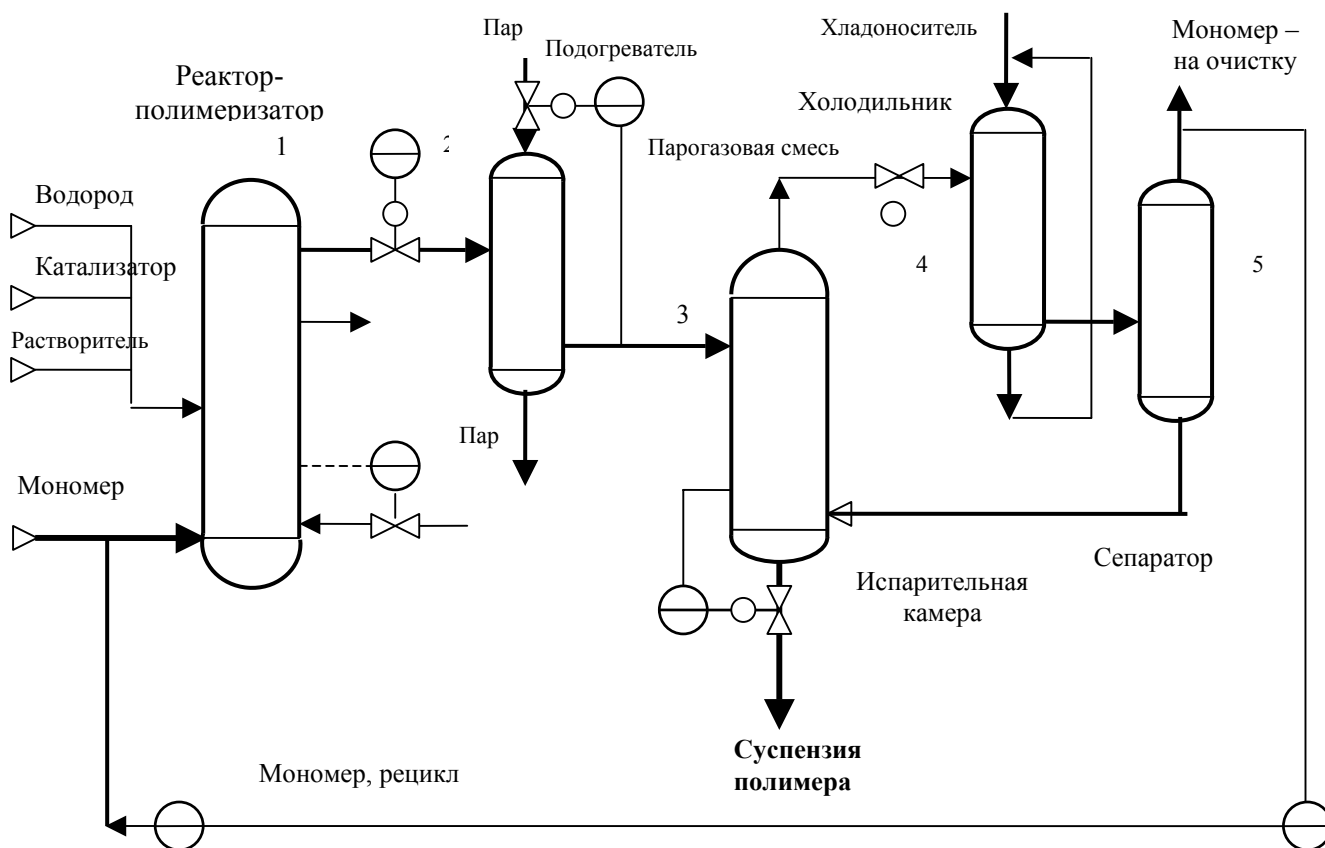


Рис. 1. Схема регулирования процесса полимеризации пропилена в производстве полипропилена: 1 – реактор-полимеризатор; 2 – подогреватель; 3 – испарительная камера; 4 – холодильник; 5 – сепаратор

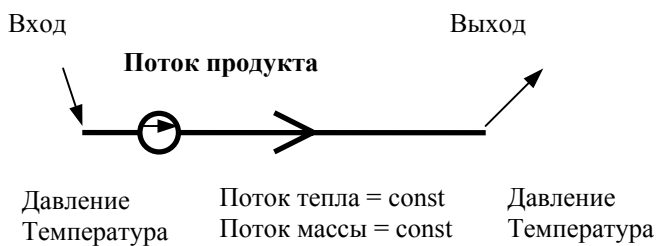
Полученная суспензия полимера вместе с непрореагировавшим мономером через подогреватель 2 поступает в испарительную камеру 3. В последней происходит выделение из жидкости растворенного мономера и испарение части растворителя. Суспензия полимера отводится из нижней части испарительной камеры и подается на выделение растворителя, а парогазовая смесь охлаждается в холодильнике 4 и поступает в сепаратор 5. Конденсат растворителя из сепаратора возвращается в испарительную камеру 3, а газовая фаза, состоящая в основном из мономера, направляется на очистку. В дальнейшем мономер вновь возвращается в реактор.

Таким образом, данная конструкция представляет собой сетевую структуру, в которой несколько видов энергоносителей образуют замкнутые и разомкнутые пути. Сетевую модель такой установки можно структурно представить в виде соединенных ветвей, которые обладают сопротивлениями (проводимостями), отражающими метрические свойства каждого устройства.

Метрические свойства представляют собой сопротивления, которые устройства, отдельные узлы установки, оказывают проходящему потоку (в регулярном режиме измеряются вязкостью и энтальпией). С точки зрения измерений метрические свойства можно также характеризовать, рассчитать как отношения воздействия к соответствующему отклику – т.е. потоку материалов через устройство. Со временем значения этих отношений могут меняться, например, по мере нарастания полимерной пленки на стенках. Это приводит к сужению каналов и их пропускной способности, к повышению давления в реакторе и линиях после реактора. Метрику также определяет теплопроводность, её изменение ухудшает теплообмен. В результате изменяются метрические свойства элементов вплоть до того, что отклик на любые воздействия может снижаться до нуля. Как следствия, возрастают давление и температура, вплоть до превышения предельно допустимых значений. Это создает опасность возникновения аварийной ситуации.

В качестве элемента установки рассмотрим отдельное устройство (рис. 2), на протяжении которого величина потока массы и давления остаются постоянными. В местах соединения элементов происходит слияние или разветвление потоков, возможно изменение давления под действием насосов, или температуры под действием нагревателей (охладителей). Это устройство можно представить структурно как поток-отклик, проходящий под действием источников воздействия по каналу, который оказывает сопротивление потоку, т.е. обладает некоторой инерцией.

Структурная схема самой установки, в соответствии с показанной на рис. 1 конструкцией, может быть представлена (рис. 3) в виде соединенных ветвей, источников воздействия, значения температуры соответствуют потенциалу в узлах сети, а токи отклика соответствуют потоку массы (мономера, катализатора, растворителя и т.д.). Стрелки в узлах обозначают внешние воздействия на систему, а кружки со стрелками – внутренние воздействия в виде насосов и нагревателей – охлаждателей.



**Источники воздействия:**

Давление и температура

**Сопротивление среды:**

Вязкость и энтальпия

**Отклики:**

Поток массы и поток тепла

Рис. 2. Отдельные устройства-ветви представляют потоки компонент (мономер, полимер, растворитель, водород) как отклики на воздействия

Структура сети содержит открытый путь от поступления в систему мономера до вывода из системы результатов полимеризации – суспензии полимера (получение которого и является основной целью процесса), водорода, растворителя и остатка – непрореагировавшего мономера. Также есть замкнутые пути – контуры циркуляции пара, растворителя, мономера, и контур циркуляции охладителя. Кроме того, мономер также может образовать контур в системе при его использовании в качестве охладителя в рубашке реактора для отвода тепла самой реакции полимеризации.

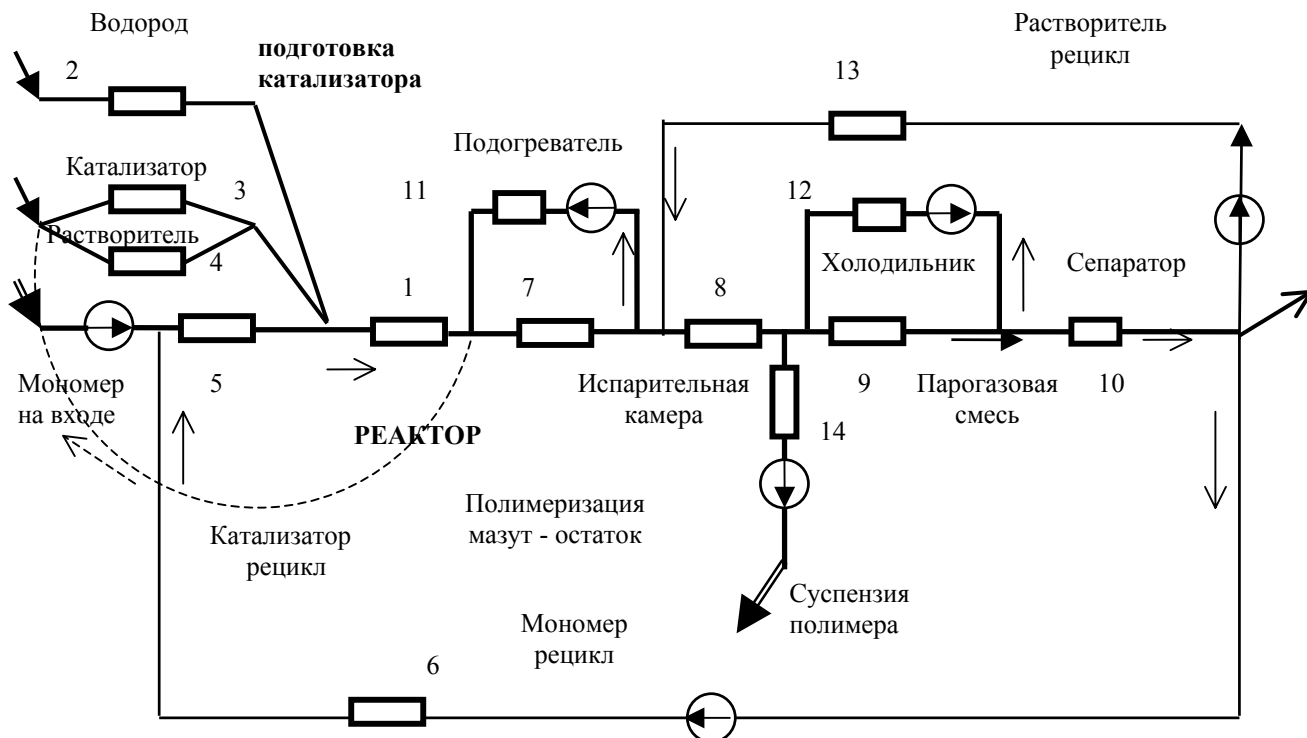


Рис. 3. Сетевая модель установки полимеризации

Ветви обозначим  $b_1, b_2, \dots, b_{14}$  и, если не возникает недоразумений, будем для простоты обозначать цифрами от 1 до 14. Рассмотрим топологию сети. Данная сеть имеет следующие топологические параметры: число ветвей  $n = 14$ , число узлов  $J = 10$ , независимых подсетей  $s = 1$  (сеть не разделена на части), независимых разомкнутых путей  $j = J - s = 10 - 1 = 9$ , независимых контуров  $m = n - j = 14 - 9 = 5$ . Из полученных пяти контуров целесообразно выбрать три контура, связанные с циркуляцией мономера, пара и хладагента, один – подготовка (растворение катализатора) и один, связанный с циркуляцией бензиновой фракции. Тонкие стрелки показывают направления тепловых и материальных потоков в ветвях сетевой модели. В данном случае считаем, что направления ветвей (ориентация) совпадают с направлениями движения потоков.

Ветвь 2 соответствует пути ввода водорода, внешний источник – насос по закачке водорода. Также введен внутренний источник, представляющий процесс нагрева мономера и внешний источник – насос по закачке мономера через ветвь 5 на установку. Ветвь 1 – реактор полимеризации, в котором мономер, поступающий при барботаже через жидкую фазу катализатора, полимеризуется. Реактор в более детальной сетевой модели будет разделен на элементы-ветви, в соответствии со структурными особенностями его конструкции в составе установки полимеризации. Ветвь 14 показывает участок, на котором производится отбор остатка, т.е. полимера, а ветвь 6 – насос (источник воздействия) и канал перекачки рециркулята оставшегося мономера на вход установки. Ветвь 3 соответствует вводу катализатора, который суспензируется с растворителем – ветвь 4.

Ветвь 7 соответствует подогревателю в контуре с ветвью 11, где источник соответствует нагреву циркулирующего пара. Ветвь 8 соответствует испарительной камере, где осуществляются описанные выше процессы. После нее через ветвь 14 производится отбор полимера, а парогазовая смесь через контур холодильника из ветвей 9 и 12 поступает в ветвь 10, представляющую сепаратор. Отсюда с выхода расходятся по своим путям на рецикл растворитель и мономер. Растворитель и часть мономера отводятся за пределы установки, а внутренний источник (насос 14 на рис. 3) показывает путь бензина на верхнюю часть испарительной камеры.

Соединенные ветви составляют сеть, где направления отдельных потоков заданы воздействием насосов и температуры, которые показаны стрелками (внешние воздействия) или кружками со стрелками (внутренние воздействия). В более сложной сетевой модели отдельными группами ветвей показана структура движения по технологической цепи каждой фракции смеси, например, водорода и растворителя. Кроме того, детально вводятся в модель все ветви и источники, соответствующие управляющим воздействиям на движение тепловых и материальных потоков.

В соответствии с тензорным методом двойственных сетей, внешние воздействия имеют отклики в базисе разомкнутых путей, а внутренние воздействия имеют отклики в базисе замкнутых путей пространства сети. Потоки энергии (тепловой и кинетической) в структуре установки разделяются на замкнутые и разомкнутые пути по их роли в технологическом процессе. Для того, что-

бы построить сетевую модель, надо рассмотреть все потоки вещества, тепловые потоки в установке, в том числе те, которые не были представлены на исходной схеме.

Количество независимых замкнутых и разомкнутых путей в сети в сумме равно числу ветвей. Замыкание разомкнутого пути сокращает число замкнутых путей и увеличивает число разомкнутых путей и наоборот. Независимые замкнутые пути, контуры составляют базис для воздействий и откликов внутри сети в замкнутых путях. Независимые разомкнутые пути составляют базис для представления воздействий извне сети, со стороны снабжающих установок, и заданы в узлах, а отклики на них возникают в разомкнутых путях.

Для **разомкнутых путей** источниками воздействия являются контравариантные компоненты вектора потока энергии. В электрической цепи аналогами являются источники тока. Откликами являются ковариантные компоненты вектора потока энергии. В электрической цепи аналогами являются напряжения (разности потенциалов на ветвях). В установке полимеризации аналогами воздействия являются разности давлений и разности температур в тех агрегатах по пути движения и преобразования углеводородов, которые обеспечивают ввод в систему исходных продуктов (мономера), прохождение по технологической цепи и вывод полимера, полученного в результате процесса. Аналогами откликов являются потоки массы и тепловой энергии, которые поступают в систему извне и *покидают* систему (в хранилища или на дальнейшую переработку).

Для **замкнутых путей** источниками воздействий являются ковариантные компоненты вектора потока энергии. Отклики – контравариантные компоненты вектора потока энергии. В электрической цепи аналогами воздействия являются источники напряжения, а отклика – токи в ветвях. В установке полимеризации аналогами являются разности давлений и температур в тех агрегатах, которые обеспечивают циркуляцию в системе реагентов, вызывающих изменения температурного режима и химические преобразования исходного сырья в продукты переработки. Аналогами откликов являются потоки массы и тепловой энергии, которые циркулируют в системе и *не покидают* её (за исключением балансовых избытков, которые образуют дополнительные разомкнутые пути).

Уравнения поведения и матрицы преобразования подсетей, которые описывают замкнутые и разомкнутые пути, двойственны по отношению друг к другу. Потоки в этих подсетях не зависят друг от друга. Это позволяет моделировать системы, в которых физический смысл протекающих процессов состоит во взаимодействии двойственных величин воздействия и отклика в замкнутых и разомкнутых системах.

В структуре сетевой модели полимеризации эти две подсети взаимодействуют и оказывают влияние друг на друга. Вместе с тем баланс для компонент потоков в одной подсети выполняется независимо от баланса потоков в другой подсети. Например, фракция мономера выполняет функции охлаждения смеси в реакторе.

### Выбор путей и матрицы преобразования

В сетевой модели, представляющей процесс полимеризации, выберем линейно независимые замкнутые  $m$  и разомкнутые  $j$  пути. Они выражаются через пути в отдельных ветвях. Пути в соединенных ветвях сетевой модели, замкнутые и разомкнутые, показаны на рис. 4.

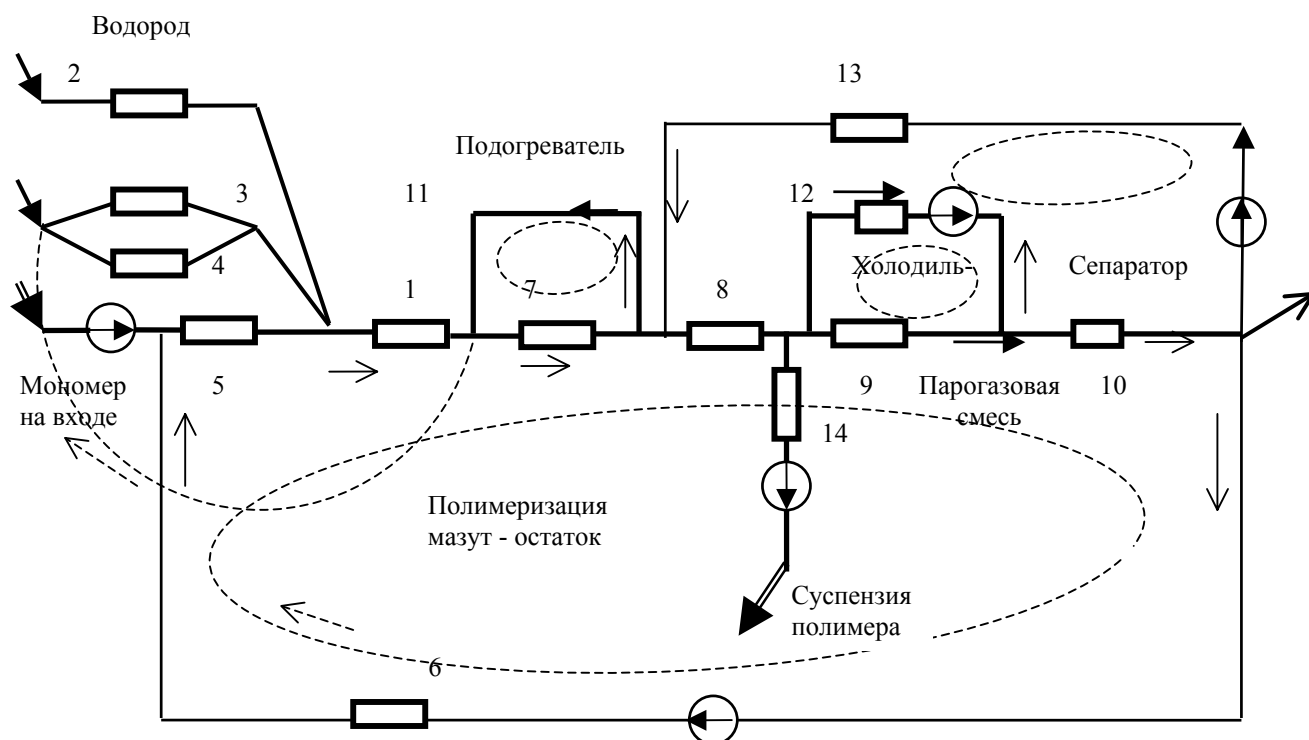


Рис. 4. Выбор путей в сетевой модели установки полимеризации

Тонкие линии со стрелками показывают выбранные в сети независимые замкнутые и разомкнутые пути, определяющие координаты векторов потоков, которые заданы в сети. Пути в отдельных ветвях выберем совпадающими с самими ветвями. Замкнутые и разомкнутые пути показаны пунктиром, направление задано стрелками. Также показаны узлы, которые определяют состав разомкнутых путей.

Матрица преобразования путей от отдельных, свободных ветвей к сети с заданной структурой соединенных ветвей, представляющих конструкцию установки полимеризации, для данной конфигурации имеет вид:

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	
1'	1				1	1	1	1	1	1					$m$
2'							1				1				$m$
3'			1	-1											$m$
4'									1			-1			$m$
5'								1	1	1			1		$m$
6'						1									$j$
7'		1													$j$
8'				1											$j$
9'									1						$j$
10'										1					$j$
11'											1				$j$
12'	1														$j$
13'													1		$j$
14'														1	$j$

Буквы  $m$  и  $j$  обозначают подматрицы преобразования замкнутых и разомкнутых путей. Цифры со штрихами обозначают и перечисляют пути в соединенной сети. Цифры без штрихов перечисляют пути в отдельных, несоединенных ветвях, которые представляют отдельные элементы установки полимеризации.

Для расчёта подсети замкнутых путей используется подматрица матрицы преобразования  $C$ , соответствующая представлению контуров в сетевой модели, в которую в данном случае вошли три строки. Два пустых столбца (2 и 14), отсутствие общих элементов столбцов 3, 4 с другими строками матрицы показывают, что фактически контурная часть сети разделена на две независимые подсети. Это очевидно также из самой схемы сетевой модели.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	
$1'$	1				1	1	1	1	1	1					$m$
$2'$							1				1				$m$
$3'$			1	-1											$m$
$4'$									1			-1			$m$
$5'$								1	1	1			1		$m$

Эта матрица используется для расчёта циклических процессов в установке, т.е. подготовки жидкой фракции катализатора, оборота пара в подогревателе, растворителя и хладагента в холодильнике. Источниками для этой подсети являются нагреватели, охладители, а также насосы, обеспечивающие циркуляцию в контурах.

Матрица обратного преобразования путей от сети с заданной структурой соединенных ветвей к отдельным ветвям имеет вид:

	1'	2'	3'	4'	5'	6'	7'	8'	9'	10'	11'	12'	13'	14'
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0
2	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
3	0	0	1	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0
4	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0
5	1	-1	0	0	-1	-1	0	0	0	0	1	-1	1	0
6	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
7	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	-1	0	0	0
8	0	0	0	0	1	0	0	0	-1	-1	0	0	-1	0
9	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
10	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0
11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0
12	0	0	0	-1	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
13	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0
14	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1

Перемножая полученные матрицы, получим единичную матрицу, что подтверждает правильность обращения. Для расчёта откликов в разомкнутых путях используется ортогональная матрица к матрице  $C$ , которая обозначена как матрица  $A$ . Их ортогональность по определению  $C = (A)^{-1}$ , т.е.  $A$  не только обратная по отношению к матрице  $C$ , но и транспонированная.



Таким образом, матрица преобразования для расчёта откликов на воздействия в разомкнутых путях (она же матрица преобразования двойственной сети  $\underline{C}$ ) имеет вид:

$$A^{\alpha, \alpha} = (C^{\alpha, \alpha})^{-1} = \underline{C} =$$

		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	
$m$	$1'$					1										$i$
$m$	$2'$					-1		1								$i$
$m$	$3'$			1												$i$
$m$	$4'$												-1			$i$
$m$	$5'$					-1			1							$i$
$=j$	$6'$					-1	1									$m$
$j$	$7'$		1													$m$
$j$	$8'$			1	1								1			$m$
$j$	$9'$								-1	1						$m$
$j$	$10'$								-1		1					$m$
$j$	$11'$					1		-1				1				$m$
$j$	$12'$	1				-1										$m$
$j$	$13'$					1			-1					1		$m$
$j$	$14'$														1	$m$

Для расчёта подсети разомкнутых путей используется подматрица матрицы преобразования, соответствующая представлению базиса открытых путей в сетевой модели, в которую в данном случае вошли 9 строк. Эта матрица используется для расчёта основного технологического процесса полимеризации от поступления на установку мономера до вывода основного продукта, т.е. полимера, а также растворителя (бензиновой фракции), непрореагировавшего мономера, пара, а также отвода с установки балансовой части катализатора.

$j$	$6'$					-1	1									
$j$	$7'$		1													
$j$	$8'$			1	1								1			
$j$	$9'$								-1	1						
$^j A = j$	$10'$								-1		1					
$j$	$11'$					1		-1				1				
$j$	$12'$	1				-1										
$j$	$13'$					1			-1					1		
$j$	$14'$															1

Данная матрица структурно описывает разомкнутые пути от входа до выхода, а источниками воздействия для нее в основном являются разности давлений, создаваемые насосами (а также контуры в двойственной сети).

Тензорный метод двойственных сетей обеспечивает создание сетевых моделей предметных областей, в том числе в области нефтепереработки и нефтехимии, которые могут применяться для расчёта, анализа, управления и прогнозирования поведения системы при изменении структуры. Сетевая модель обеспечивает расчёт изменений параметров процессов при изменениях структуры связей компонент, подсистем, например, установки полимеризации, связанных с отключением (или нарастанием полимерной пленки), переключением, выходом из строя, разрушением различных частей конструкции по причине возник-

новения аварийных ситуаций.

Совокупность результатов расчёта различных вариантов поведения модели системы при изменениях структуры, в том числе в процессе возникновения предаварийных ситуаций, аварий, взрывов и пожаров, может применяться для разработки алгоритмов и программ для АСУТП, а также инструкций поведения персонала при возникновении (или опасности возникновения) нештатных предаварийных ситуаций.

#### Литература

1. **Петров А.Е.** Тензорный метод двойственных сетей // Матер. 14-й науч.-техн. конф. "Системы безопасности" – СБ-2005. М.: ООО ЦИТиП, 2007. 496 с.
2. **Федоров А.В., Лукьянченко А.А., Костюченков Д.К.** Этапы построения сетевой математической модели технологического процесса нефтепереработки с учетом прогноза аварийных ситуаций. М.: Академия ГПС МЧС России, 2005. С. 205-209.
3. **Петров А.Е.** Тензорный метод двойственных сетей. М.: ООО ЦИТиП, 2007. 610 с. Дополненное Интернет-издание на официальном сайте кафедры САПР МГГУ. Режим доступа: <http://sapr.msmu.ru/lectmaterials/tmdc.pdf>, свободный, 2009.