

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПРОИЗВОДСТВА ПОЛИЭТИЛЕНТЕРЕФТАЛАТА

Н.Н. Дорогов, М.И. Залого, В.Г. Шевченко

Рассмотрена актуальная для производства задача подбора режимов технологических линий получения полимера пищевого назначения, имеющего близкие качественные характеристики по вязкости и содержанию побочных продуктов. Задача решалась путем применения адаптированных к конкретным технологическим линиям математических моделей [1, 2] и программ для расчета требуемых режимных параметров.

Введение

Известно, что в силу различных причин качественные характеристики полимера, получаемого с разных технологических линий, неодинаковы. Такая проблема актуальна для химического цеха полиэтилентерефталата (ПЭТФ) завода оргсинтеза ОАО «МОГИЛЕВХИМВОЛОКНО», где работают 3 независимые линии поликонденсации с различным аппаратным оформлением. При этом к выпускаемому полимеру предъявляются жесткие требования по качественным характеристикам. В докладе рассматривается задача подбора таких режимов технологических линий получения полимера пищевого назначения марки F, которые обеспечивают близкие значения вязкости и содержания побочных продуктов. Проблема решалась путем применения адаптированных к конкретным технологическим линиям математических моделей и программ для расчета требуемых режимных параметров.

Общая задача решалась в три этапа:

1) увеличение диапазона производительностей базовой технологической линии (ТЛ2) до 3,47 м³/ч по ДМТ (ранее максимальная производительность составляла 3,2 м³/час), с помощью математической модели подобраны режимные параметры аппаратов, обеспечивающие устойчивую работу линии;

2) использование возможности снижения температурного профиля по трубам каскада линий ТЛ1, ТЛ3 без ухудшения качественных характеристик полимера. Этап выполнен применением программы оптимизации;

3) применение математических моделей для вычисления рекомендуемых технологических режимов для регламентных производительностей технологических линий ТЛ1, ТЛ2, ТЛ3.

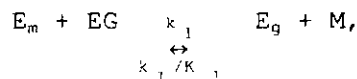
Поставленные задачи весьма актуальны и важны для производства в связи с планом технического развития ОАО «МОГИЛЕВХИМВОЛОКНО» с целью оптимизации и интенсификации технологических процессов на линиях поликонденсации химического цеха. Следует признать достаточную сложность решения поставленных проблем в связи с необходимостью проведения экспериментов на работающих многотонных линиях. В связи с этим было принято решение о совместной работе опытных специалистов по метрологии, технологии и математическому моделированию при назначении конкретных режимных параметров аппаратов технологических линий.

Структура математических моделей технологических линий

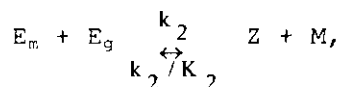
Технологические линии состоят из ряда аппаратов: каскада реакторов перэтерификации (15–18 единиц), реакторов отгона этиленгликоля, предварительного и основного поликонденсаторов. Математические модели линий формируются как

последовательность моделей отдельных аппаратов, причем выходные данные предыдущего аппарата являются входными данными следующего. В основе математической модели аппарата лежит система 10 химических реакций (с 11 компонентами), в качестве которых рассматриваются химические реакции приведенные ниже:

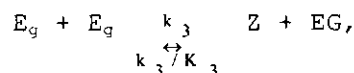
реакция эфирного взаимодействия



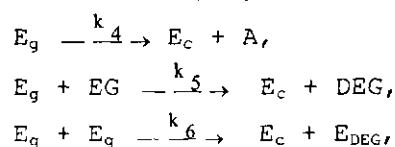
реакция переэтерификации



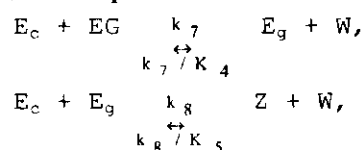
реакция поликонденсации



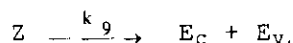
реакции образования побочных продуктов – А, DEG и E_c



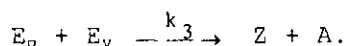
реакции этерификации с образованием воды W



реакция разложения диэфирных групп



реакция поликонденсации винильных концевых групп



Характерной особенностью реакций является отсутствие или крайне незначительные тепловые эффекты, однако большое количество тепла идет на испарение летучих компонентов (в основном метанола М и этиленгликоля EG).

Дифференциальные уравнения материального баланса относительно изменений числа молей компонентов в жидкой фазе:

$$\frac{1}{V} \times \frac{de_m}{dt} = -R_1 - R_2, \quad \frac{1}{V} \times \frac{dm}{dt} = R_1 + R_2 - Q_m \times (t)$$

$$\frac{1}{V} \times \frac{de_g}{dt} = R_1 - R_2 - 2R_3 - R_4 - R_5 - 2R_6 + R_7 - R_8 - R_{10},$$

$$\frac{1}{V} \times \frac{dg}{dt} = -R_1 + R_3 - R_7 - Q_g \times (t), \quad \frac{1}{V} \times \frac{da}{dt} = R_4 + R_{10} - Q_a \times (t)$$

$$\frac{1}{V} \times \frac{dz}{dt} = R_2 + R_3 + R_8 - R_9 + R_{10}, \quad \frac{1}{V} \times \frac{dd}{dt} = R_5,$$

$$\frac{1}{V} \times \frac{de_c}{dt} = R_4 + R_5 + R_6 - R_7 - R_8 + R_9, \quad \frac{1}{V} \times \frac{de_d}{dt} = R_6$$

$$\frac{1}{V} \times \frac{dw}{dt} = R_7 + R_8 - Q_w \times (t),$$

$$\frac{1}{V} \times \frac{de_v}{dt} = R_9 + R_{10}.$$

Здесь V —объем реагирующей смеси, который за счет удаления летучих компонентов постепенно уменьшается;

R_i —скорости реакций;

$Q_m(t)$, $Q_g(t)$, $Q_a(t)$, $Q_w(t)$ —скорости ухода летучих компонентов (метанола, этиленгликоля, ацетальдегида, воды) в газовую фазу.

Компоненты: g —этиленгликоль, m —метанол, d —диэтиленгликоль, a —ацетальдегид, w —вода;

Концевые группы: e_m —метоксильные, e_v —винильные, e_g —гидроксиэтилэфирные,

e_d —диэтиленгликольвключенные, e_c —карбоксильные;

z —дизфирные группы.

Скорости реакций:

$$\begin{aligned} R_1 &= k_1(2e_m g - e_g m / K_1) / V^2, & R_6 &= k_6 e_g e_g / V^2 \\ R_2 &= k_2(e_m e_g - 2z m / K_2) / V^2, & R_7 &= k_7(2e_c g - e_g w / K_4) / V^2 \\ R_3 &= k_3(e_g^2 - 4z g / K_3) / V^2, & R_8 &= k_8(e_c e_g - 2z w / K_5) / V^2 \\ R_4 &= k_4 e_g / V, & R_9 &= k_9 z / V \\ R_5 &= 2k_5 e_g g / V^2, & R_{10} &= k_{10} e_v e_g / V^2 \end{aligned}$$

Для проведения расчетов по моделям требуется знание констант скоростей реакций, молярных объемов, давлений паров летучих компонентов, теплот парообразования, теплоемкостей.

Экспериментальная часть

1 Увеличение производительности технологической линии ТЛ2

Для выполнения поставленной задачи выбрана стратегия поэтапного повышения производительности ТЛ2 и стабилизации технологического процесса на каждом этапе. Выбрана следующая последовательность этапов повышения производительности: 3,2 м³/ч, 3,3 м³/ч, 3,4 м³/ч, 3,47 м³/ч по сырьевому компоненту диметилтерефталату (ДМТ). Определение параметров технологических режимов производилось с помощью математических моделей [1,2].

Последовательность проведения работы:

а) выполняется прогнозный расчет технологического процесса на ТЛ2 с производительностью по ДМТ 3,47 м³/ч по математической модели;

б) выполняются прогнозные расчеты на той же линии для этапов с производительностью 3,2 м³/ч, 3,3 м³/ч, 3,4 м³/ч;

в) поэтапно достигаются на ТЛ2 производительности 3,2 м³/ч, 3,3 м³/ч, 3,4 м³/ч, 3,47 м³/ч с учетом результатов п. б), стабилизируется технологический процесс на каждом этапе и выполняются лабораторные анализы полученного полимера;

г) производится сравнительный анализ показателей качества произведенного полимера согласно лабораторным анализам и результатам расчета по математическим моделям.

В результате планируемая производительность ТЛ2 достигнута. Линия устойчиво работает с производительностью 3,47 м³/ч при выпуске полимера марки «F». Рассчитанные по математической модели значения степени поликонденсации (СП) и значения лабораторных анализов относительной вязкости SV при всех поэтапно достигнутых значениях производительности линии стабильные и соответствуют требованиям технологического регламента. Рассчитанные по модели значения содержания в полученном полимере диэтиленгликоля и карбоксильных групп $COOH$ относительно лабораторных анализов стабильно занижены, поскольку математическая модель не учитывает как образование ДЭГ-включенных концевых групп E_{deg} за счет обратимой реакции

полимеризации $Eg + E deg \leftrightarrow Z + DEG$, так и влияние герметичности аппаратов и технологических коммуникаций линии на образование карбоксильных групп.

2 Минимизация температурного режима на технологической линии ТЛ 1

Целью является определение возможности снижения температурного профиля по трубам каскада линий поликонденсации без ухудшения качественных характеристик полимера. Актуальность этапа заключается в получении экономического эффекта за счет уменьшения расхода теплоносителя, используемого для обогрева самих реакторов и технологических коммуникаций. Предпосылкой к выполнению работы являются теоретические разработки [2], где показано возможное решение данной проблемы путем применения алгоритмов оптимизации для определения наилучшего (то есть минимизирующего расход тепловой энергии) температурного профиля. Полученное решение и его характер можно считать прогнозным, показывающим тенденции корректировки температур реальных реакторов, приводящих к уменьшению расхода теплоносителя.

По поводу реализации оптимального решения на работающей технологической линии было рекомендовано постепенное приближение к полученному оптимальному профилю, то есть обеспечение последовательности некоторых субоптимальных режимов, при каждом из которых работа каскада будет стабильно постоянной (устойчивой). Подобный подход позволяет за несколько итераций приблизиться к прогнозируемому оптимальному профилю. На каждом субоптимальном решении требуется производить лабораторные замеры показателей качества полимера, что не позволит отклоняться от существенного их нарушения. Рекомендуемый подход был использован в цеховых условиях.

Условия проведения работы.

Для сравнения работы линий поликонденсации при выпуске пищевого полимера марки «F» выбраны технологические линии ТЛ1 (с производительностью 3,2 м³/ч по ДМТ) и ТЛ2 (с производительностью 3,12 м³/ч), причем показатели технологической линии ТЛ2 считаются базовыми. Перед началом эксперимента режимные параметры обеих технологических линий стабилизируются.

При этих условиях выполняются лабораторные анализы качественных характеристик полимера. Далее выполняется прогнозный расчет оптимального профиля температур в реакторах каскада ТЛ1 по математической модели. Не допуская срыва технологического процесса и выдерживая значения вязкости на выходе основного поликонденсатора на уровне SV=825 единиц устанавливается снижение температур реакторов, соответствующее 1-му субоптимальному режиму. При этом выполняется анализ качественных характеристик полимера ТЛ1 и ТЛ2. Линия ТЛ1 работает на этом режиме 2–3 суток. Выполняется расчет технологических показателей аппаратов линии ТЛ1 по математической модели. Устанавливается дальнейшее снижение температур реакторов каскада, соответствующее 2-му субоптимальному режиму. Выполняется анализ качественных характеристик полимера на ТЛ1 и ТЛ2. Линия ТЛ1 работает на этом режиме 2 суток. Выполняется расчет технологических показателей аппаратов линии ТЛ1 по математической модели.

Из анализа полученных результатов расчетов по математическим моделям и анализа лабораторных данных показателей полимера следует, что получено значительное сближение расчетных качественных показателей процесса поликонденсации по стадиям технологических линий ТЛ1 и ТЛ2, влияние снижения профиля температур в трубах каскада незначительно влияет на расчетные качественные показатели полимера в главном поликонденсаторе, что совпадает с результатами технологических испытаний.

Работа со сниженным температурным профилем позволяет получить значительный экономический эффект (до 10%) за счет уменьшения расхода теплоносителя. Указанное направление дальнейшей работы по оптимизации температурных режимов технологических линий поликонденсации можно считать весьма перспективным.

3 Сравнительный анализ качественных показателей полимера технологических линий ТЛ1, ТЛ2, ТЛ3

Цель работы – сравнение и анализ результатов расчета качественных показателей полимера марки «F», полученных по моделям технологических линий ТЛ1, ТЛ2, ТЛ3 с результатами химических анализов для следующих производительностей по ДМТ: а) линия ТЛ1 – 3,47 м³/ч, б) линия ТЛ2 – 3,47 м³/ч, в) линия ТЛ3 (ТЛ 3.2) – 2,92 м³/ч.

Режимные параметры перечисленных линий поликонденсации соответствуют наработанным значениям в процессе их длительной эксплуатации (кроме ТЛ2, для которой указанный режим был рассчитан сравнительно недавно). Актуальность работы состоит в том, чтобы исследовать возможности сближения расчетных и лабораторных показателей качества полимера.

При проведении работы одновременно фиксируются режимные параметры и результаты лабораторных анализов качественных показателей линий поликонденсации ТЛ1, ТЛ2, ТЛ3(ТЛ3.2) при выпуске полимера марки «F». Далее выполняются расчеты показателей технологических аппаратов на каждой линии поликонденсации с помощью математических моделей для зафиксированных режимов и производится анализ и сравнение показателей качества полимера.

Полученные результаты показывают адекватность реальным технологическим процессам, при этом для лабораторных значениях вязкости по линиям поликонденсации $SV=824-825$ единиц диапазон расчетных значений степени поликонденсации составил $СП=112,27-113,50$.

4 Рекомендуемые технологические режимы для регламентных производительностей технологических линий ТЛ1, ТЛ2, ТЛ3

В химическом цехе для обеспечения выпуска гранулята ПЭТФ работают 3 независимые линии поликонденсации с различным аппаратным оформлением и различной конфигурацией включения аппаратов в технологический процесс. При этом к выпускаемому полимеру предъявляются жесткие требования по качественным характеристикам, которые в основном зависят от степени полимеризации и количества побочных продуктов в полимере.

Учитывая специфику дальнейшей переработки полимера потребителем, важно сближение качественных показателей ПЭТФ в рамках регламентных требований, между гранулятом различных линий поликонденсации. Для этих целей разработаны математические модели каждой линии поликонденсации, которые учитывают специфику линии и обеспечивают расчет значения степени полимеризации и содержание в полимере продуктов побочных реакций.

Количество содержащихся побочных продуктов в полимере зависит от ряда факторов, в частности качества исходного сырья и катализаторов, герметичности аппаратов линий поликонденсации, точности измерения и управления режимными параметрами, оптимальной нагрузки каждого аппарата линий в отдельности, технических характеристик и конфигурации включенных в линию аппаратов, режимных параметров: производительности линий, соотношения этиленгликоль: диметилтерефталат (ЭГ:ДМТ), дозировки добавок и катализаторов, температурного профиля по аппаратам линий, давления, времени пребывания продукта в аппаратах.

Первые три фактора не учитываются моделями, принимая их состояние как «идеальное», что несколько сказывается на разнице между расчетными и реальными качественными показателями полимера.

Так как в результате реконструкции объем реакционной массы в каскаде линии ТЛ1 значительно увеличен по сравнению с первоначальным (примерно в 2 раза), что сильно увеличило время пребывания расплава и ухудшило качество полимера, то в соответствии с расчетами по моделям, рекомендуется провести экспериментальную проверку влияния уровня в последних трех трубах каскадов на ход процесса поликонденсации, прежде чем принимать решение проводить подобную реконструкцию на других линиях.

Учитывая большое влияние повышенных значений температур на разложение полимера и увеличение количества винильных концевых групп, что ухудшает цветовые

характеристики полимера, нами рекомендуется рассмотреть вопрос ремонта или замены выгружных насосов главных поликонденсаторов (например, на линии ТЛ1 повышение температуры составляет порядка 5°C).

Заключение

Результатами расчетов по математическим моделям, подтвержденными экспериментально, установлено, что количество побочных продуктов в полимере на линии ТЛ3.2, ниже соответствующих показателей линий ТЛ1, ТЛ2, а минимальная разница расчетных качественных показателей между полимером различных линий, наблюдается при близких значениях производительностей. Разработанные модели хорошо передают полученные экспериментальные данные и могут быть использованы для решения задач оптимального управления режимами технологических линий.

Литература

1. Дорогов, Н.Н. Математическое моделирование и оптимизация стадии мономеризации получения полиэфира полиэтилентерефталата//Рос. АН. Теоретические основы химической технологии. — 2000, — Т. 34, №5, — с. 537–542.
2. Дорогов, Н.Н. Математическое моделирование и оптимизация технологических процессов в производстве полимера полиэтилентерефталата. — Минск: Издательский центр БГУ, 2002. —120 с.

Поступила в редакцию 20.03.2007