https://doi.org/10.31649/1997-9266-2019-143-2-15-20

УДК 004.89 УДК 541.515

М. Г. Лорія[1]

КОМБІНОВАНА МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ ТРИПОЛИЧНОГО ГАЗОВОГО РЕАКТОРА У ВИРОБНИЦТВІ АМІАКУ

[1]Східноукраїнський національний університет імені Володимира Даля, Сєвєродонецьк

Запропоновано спосіб розробки математичної моделі для подальшої оптимізації й керування складним технологічним об'єктом. Виконано аналіз технологічного процесу синтезу аміаку як об'єкта керування та розроблено інформаційно-логічну схему триполичного газового реактора з вбудованим теплообмінником. Розроблено математичну модель полки газового реактора синтезу аміаку, математичну модель внутрішнього теплообмінника, математичну модель триполичного газового реактора синтезу аміаку. Для визначення невідомих параметрів математичної моделі запропоновано систему тестових впливів на триполичний газовий реактор шляхом змін витрат синтез-газу по холодним байпасам на відому фіксовану величину. Розробка математичної моделі включає два етапи. На першому етапі на основі матеріальних і теплових балансів кожної полиці триполичного газового реактора розробляється детермінована модель. Незважаючи на її невисоку точність, вона дає можливість оцінити вид критеріальної функції в широкому діапазоні зміни аргументів з урахуванням її багатоекстремальності, і виділити область глобального екстремуму. На другому етапі виконується адаптація моделі на основі експериментальних даних, що отримуються з об'єкта керування, з використанням імовірнісних методів. Це дозволяє забезпечити точність параметрів, що моделюються, за рахунок врахування всіх збурювальних впливів. Отримана математична модель має четвертий порядок, що дозволяє достатньо просто отримати функціональну залежність концентрації цільового компонента на виході триполичного газового реактора від вхідних регулюючих і збурювальних параметрів. Запропоноване рівняння може бути використано для розв'язання оптимізаційної задачі. Запропонована математична модель може бути використана для побудови системи управління триполичним газовим реактором з моделлю у виробництві аміаку.

Ключові слова: виробництво аміаку, газовий реактор, математична модель, інформаційно-логічна схема, тестові впливи.

Вступ

Підтримка оптимальних параметрів роботи багатотоннажних безперервних виробництв є актуальним завданням забезпечення їх прибутковості. Для вирішення такого завдання слід розробити математичну модель процесу. Ця модель має бути зручною у використанні, мати порядок не більш четвертого (тому що розв'язок рівнянь до четвертого порядку залежить тільки від коефіцієнтів рівняння), та бути максимально адекватною процесу.

У хімічній промисловості у виробництвах широко застосовуються багатополичні реактори, де для забезпечення необхідних параметрів процесу в заданих областях реакційного об'єму необхідно управляти ходом хімічної реакції. Наприклад, забезпечувати максимальний ступінь перетворення вихідних компонентів у цільові продукти зворотної реакції шляхом підтримки оптимального профілю температур по висоті реактора. Складність завдання полягає в тому, що процес у реакторі наближається до моделі ідеального витиснення, яка має враховувати градієнт параметрів уздовж просторової координати. [1] Прикладом таких виробництв є виробництва метанолу, аміаку та ін. [2]. Врахування цих особливостей процесу приводить до того, що порядок рівняння математичної моделі зростає до дванадцятого і вище. [3] Використання таких моделей для задач оптимізації майже неможливо, тому що розв'язок таких рівнянь залежить не тільки від коефіцієнтів моделі, але й від діапазону зміни вхідних параметрів.

Схематично багатополичний газовий реактор з вбудованим теплообмінником (для зручності розуміння показаний окремо), показаний на рис. 1.

© М. Г. Лорія, 2019

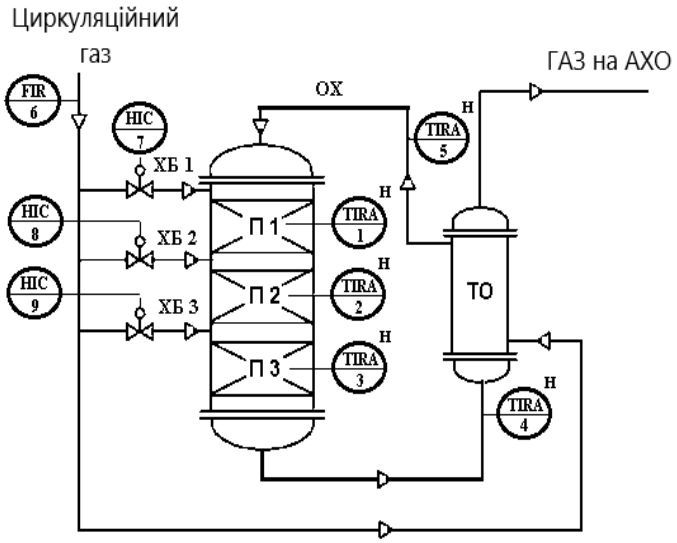

Рис. 1. Схема триполичного газового реактора з вбудованим теплообмінником: ТО — теплообмінник; П1— П3 — перша, друга й третя полиці з каталізатором; ОХ — потік основного ходу синтез-газу; ХБ1—ХБ3 — потоки холодних байпасів синтез-газу на відповідні полиці реактора; АХО — аміачно-холодильне відділення; TIRA 1—6 — прилади контролю температури; FIR 1—7 — прилад контролю витрати синтез-газу; HIC 8—10 — панелі дистанційного керування електричними засувками

Мета роботи — розробити математичну модель триполичного газового реактора, яка дозволить провести оптимізацію роботи цього апарата.

Результати дослідження

З точки зору керування, триполичні газові реактори є складними об’єктами, які характеризуються великою кількістю збурювальних параметрів і множинними внутрішніми зв’язками. Реактор працює у такий спосіб. Циркуляційний газ з температурою близько 606 К на вході колони розділяється на два потоки (дільник Д1): основний хід, який через вбудований теплообмінник ТО, де він нагрівається теплом газів, що відходять, до температури близько 703 К, подається на першу полицю реактора П1; і холодний байпас, який, у свою чергу, поділяється на три потоки (дільник Д2) і призначений для підтримки температури на полицях реактора П1— П3 діапазоні 783…803 К. На полицях реактора відбувається екзотермічна реакція синтезу аміаку. З виходу третьої полиці газ подається у вбудований теплообмінник ТО, де віддає своє тепло газу, що надходить у колону [4].

Інформаційно-логічна схема триполичного газового реактора показана на рис. 2.

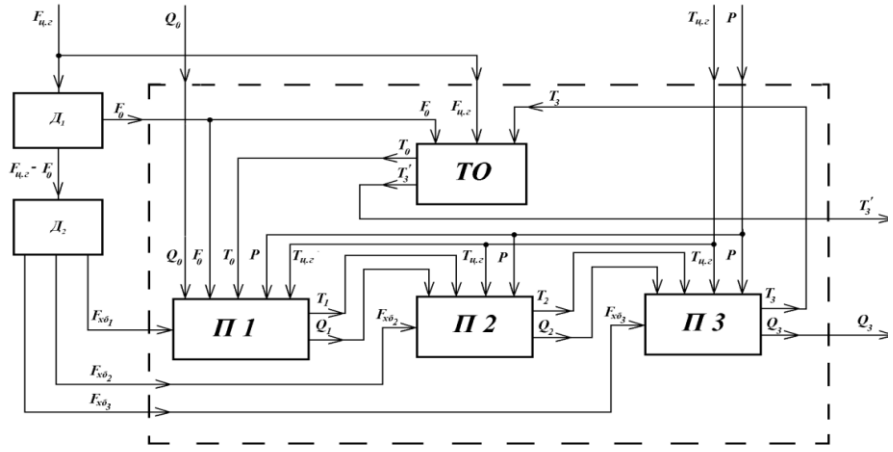

Рис. 2. Інформаційно-логічна схема триполичного газового реактора з вбудованим теплообмінником: Д1, Д2 — математичні оператори розподілу потоку

Називатимемо вихідними ті параметри системи, які характеризують її стан і підтримка значень яких є метою системи регулювання. Регулювальні параметри — це параметри, за допомогою яких ведеться регулювання (витрати матеріальних і енергетичних потоків). Збурювальні параметри — це

параметри, що впливають на вихідні параметри, але не можуть бути регулювальними [5].

Аналіз технологічного процесу, що відбувається в триполичному газовому реакторі, як об'єкта керування показує, що технологічний об'єкт має дві вихідні координати: концентрацію цільового продукту Q_3 на виході з реактора й температуру T_3' газу на виході реактора після теплообмінника ТО. Для wmoго об'єкта температурний режим по висоті газового реактора однозначно визначає концентрацію цільового компонента на його виході, а, отже, і температуру T_3, яка визначає температури T_0 і T_3'. Виходячи з того, що з достатнім ступенем точності об'єкт можна розглядати як замкнену термодинамічну систему, величина концентрації Q_3 однозначно визначає температуру T_3, і, відповідно, T_0 і T_3'. Тому регулювання або стабілізація температури T_3' не має в цьому випадку особливого сенсу. Особливістю цього об'єкта є те, що для регулювання одного параметра — концентрації цільового компонента Q_3, використовуються три регулювальні параметри — витрати синтез-газу по холодним байпасам на полиці реактора. До збурювальних параметрів відносяться: витрата циркуляційного газу $F_{\text{ц.г.}}$, його температура $T_{ц\cdot г.}$ і концентрація цільового компонента на вході реактора Q_0. Тиск циркуляційного газу P можна також віднести до збурювальних координат тому що, по-перше, цей параметр стабілізується компресором синтез-газу, а по-друге, при ступені перетворення синтез-газу в готовий продукт близько 10 % зменшення тиску за рахунок реакції становить приблизно 5 %. Отже, зі зміною ступеня перетворення в межах 8…12 % тиск зміниться в межах 4…6 %, що укладається в похибку вимірювального каналу тиску. [6]

Мета оптимального керування газовим триполичним реактором полягає у тому, щоб перерозподілити циркуляційний синтез-газ за фізичними каналами газового реактора для досягнення максимального ступеня перетворення синтез-газу в цільовий продукт, і, відповідно, максимальної концентрації цільового компонента на виході газового реактора.

Для розв'язання задачі оптимізації перш за все треба розробити математичну модель триполичного газового реактора. Розробка математичної моделі включає два етапи. На першому етапі на основі матеріальних і теплових балансів кожної полиці триполичного газового реактора розробляється детермінована модель. Незважаючи на її невисоку точність, вона дає можливість оцінити вид критеріальної функції в широкому діапазоні зміни аргументів з урахуванням її багатоекстремальності, і виділити область глобального екстремуму. На другому етапі виконується адаптація моделі на основі експериментальних даних, що отримуються з об'єкта керування, на основі імовірнісних методів. Це дозволяє забезпечити точність параметрів, що моделюються, за рахунок врахування всіх збурювальних впливів. [6]

Створення адекватної моделі має на меті врахування нелінійних залежностей вихідних параметрів процесу від вхідних, наприклад, швидкості реакції від тиску та температури. Це неминуче призводить до збільшення ступеня рівнянь, якими описується об'єкт керування. Використання рівнянь високих порядків суттєво ускладнює процес оптимізації, а саме пошук оптимальних значень параметрів технологічного процесу. У більшості випадків доводиться виконувати наближені розв'язки, що знижує точність розроблювальної моделі [7].

Розглянемо першу полицю реактора й складемо для неї рівняння матеріального й теплового балансів.

$$\begin{cases} F_{\text{хб1}}c_1T_{\text{хб1}} + F_0c_1T_0 + r\rho_1V_1K_0\exp\left(-\dfrac{E}{RT_1}\right)\dfrac{P}{P_0}\left(Q_1 - Q_0\right) = \left(F_0 + F_{\text{хб1}}\right)c_1T_1, \\ F_{\text{хб1}}Q_0 + F_0Q_0 + \rho_1V_1K_0\exp\left(-\dfrac{E}{RT_1}\right)\dfrac{P}{P_0}\left(Q_1 - Q_0\right) = \left(F_0 + F_{\text{хб1}}\right)Q_1, \end{cases} \quad (1)$$

де $F_{\text{хб1}}$ і F_0 — витрати холодного байпасу й основного ходу на першу полицю, кг/с; $T_{\text{хб1}}$, T_0 — температури холодного байпасу й основного ходу на вході першої полиці, К; c_1 — теплоємність газової суміші, Дж/(кг·К); r — питома теплота реакції, Дж/кг; ρ_1 — густина газового потоку, кг/м^3; V_1 — реакційний об'єм, м^3; E — енергія активації, Дж/моль; K — константа швидкості реакції, 1/с; P і P_0 — поточний і номінальний тиск процесу, Па; T_1 — температура на першій полиці, К; Q_0 і Q_1 — концентрація цільового компонента на вході й виході полки, мас. частки.

Система рівнянь (1) являє собою статичну математичну модель першої полиці газового реактора.

Аналогічно складемо матеріальний і тепловий баланси другої і третьої полиць реактора (у рівняннях (2) і (3) індекси 2 і 3 вказують на нумерацію полиці реактора).

$$\begin{cases} \left(F_{\text{хб1}}+F_0\right)c_1T_1+F_{\text{хб2}}c_1T_{\text{хб2}}+r\rho_2V_2K_0\exp\left(-\dfrac{E}{RT_2}\right)\dfrac{P}{P_0}\left(Q_2-Q_1\right)=\left(F_0+F_{\text{хб1}}+F_{\text{хб2}}\right)c_2T_2, \\ F_{\text{хб2}}Q_0+\left(F_0+F_{\text{хб1}}\right)Q_1+\rho_2V_2K_0\exp\left(-\dfrac{E}{RT_2}\right)\dfrac{P}{P_0}\left(Q_2-Q_1\right)=\left(F_0+F_{\text{хб1}}+F_{\text{хб2}}\right)Q_2; \end{cases} \quad (2)$$

$$\begin{cases} \left(F_{\text{хб2}}+F_{\text{хб1}}+F_0\right)c_2T_2+F_{\text{хб3}}c_1T_{\text{хб3}}+r\rho_3V_3K_0\exp\left(-\dfrac{E}{RT_3}\right)\dfrac{P}{P_0}\left(Q_3-Q_2\right)=\left(F_0+F_{\text{хб1}}+F_{\text{хб2}}+F_{\text{хб3}}\right)c_3T_3, \\ F_{\text{хб3}}Q_0+\left(F_0+F_{\text{хб1}}+F_2\right)Q_2+\rho_3V_3K_0\exp\left(-\dfrac{E}{RT_3}\right)\dfrac{P}{P_0}\left(Q_3-Q_2\right)=\left(F_0+F_{\text{хб1}}+F_{\text{хб2}}+F_{\text{хб3}}\right)Q_3. \end{cases} \quad (3)$$

Математичну модель вбудованого теплообмінника складемо на основі його теплового балансу

$$F_0c_1\left(T_0-T_{\text{цг}}\right)=F_{\text{цг}}c_3\left(T_3-T_3^{'}\right), \quad (4)$$

де T_3' — температура газової суміші на виході ТЕ, *К*; $F_{\text{цг}}=F_0+F_{\text{хб1}}+F_{\text{хб2}}+F_{\text{хб3}}$ — витрата циркуляційного газу, *кг/с*.

Рівняння (1)—(4) утворюють систему рівнянь, яка описує триполичний газовий реактор з внутрішнім теплообмінником. Розв'язок цієї системи відносно концентрації цільового компонента на виході реактора Q_3 є математичною моделлю триполичного реактора по концентрації. Ця залежність є дуже громіздкою і в статті не наводиться. Концентрація цільового компонента на виході газового реактора є функцією від декількох параметрів

$$Q_3=f\left(F_{\text{хб1}},F_{\text{хб2}},F_{\text{хб3}},F_0,F_{\text{цг}},T_{\text{цг}},Q_0,P\right). \quad (5)$$

Аналізуючи отриману математичну модель, робимо висновок, що не всі змінні можуть бути визначені. В цьому рівнянні є чотири невідомі величини: концентрація цільового компонента на виході реактора Q_3, витрати синтез-газу на полиці реактора по холодним байпасам $F_{\text{хб1}}$—$F_{\text{хб3}}$. Таким чином, для того щоб визначити їх, необхідно скласти ще три додаткові рівняння. Для цього в роботі пропонується сформувати тестові впливи на об'єкт керування, які будуть полягати в зміні витрати одного з холодних байпасів на відому фіксовану величину Δ за сталого значення всіх інших витрат. [5] Для реалізації цього підходу необхідно мати можливість стабілізувати значення витрат потоків холодних байпасів, наприклад, ввести одноконтурні системи регулювання витрат холодних байпасів. Таким чином, збільшення витрати одного з холодних байпасів, наприклад $F_{\text{хб1}}$, на величину Δ приведе до зменшення витрати синтез-газу по основному ходу $F_{\text{о}}$ на таку ж величину Δ. Після завершення перехідних процесів на виході газового реактора встановиться концентрація цільового компонента на рівні Q'$_3$. Почергова зміна витрат кожного з холодних байпасів на фіксовану величину Δ дасть можливість отримати додаткові значення концентрацій цільового компонента на виході триполичного газового реактора Q'$_3$, Q"$_3$ та Q"'$_3$. На підставі цього можна скласти додаткові три рівняння.

$$Q_3^{'}=f_1\left(F_{\text{хб1}}+\Delta_1,F_{\text{хб2}},F_{\text{хб3}},\left(F_0-\Delta_1\right),F_{\text{цг}},T_{\text{цг}},Q_0,P\right); \quad (6)$$

$$Q_3^{''}=f_2\left(F_{\text{хб1}},\left(F_{\text{хб2}}+\Delta_1\right),F_{\text{хб3}},\left(F_0-\Delta_1\right),F_{\text{цг}},T_{\text{цг}},Q_0,P\right); \quad (7)$$

$$Q_3^{'''}=f_3\left(F_{\text{хб1}},F_{\text{хб2}},\left(F_{\text{хб3}}+\Delta_1\right),\left(F_0-\Delta_1\right),F_{\text{цг}},T_{\text{цг}},Q_0,P\right). \quad (8)$$

Використання рівнянь (6)—(8) дозволяє вирішити питання невизначеності рівняння (5).

Розв'язок системи рівнянь (5)—(8) можна навести у вигляді

$$\begin{aligned} a_4Q_3^4+a_3Q_3^3+a_2Q_3^2+a_1Q_3+a_0=&\phi_1\left(F_{\text{хб1}}\right)+\phi_2\left(F_{\text{хб2}}\right)+\phi_3\left(F_{\text{хб3}}\right)+\phi_{12}\left(F_{\text{хб1}},F_{\text{хб2}}\right)+ \\ &+\phi_{13}\left(F_{\text{хб1}},F_{\text{хб3}}\right)+\phi_{23}\left(F_{\text{хб2}},F_{\text{хб3}}\right)+\phi_{123}\left(F_{\text{хб1}},F_{\text{хб2}},F_{\text{хб3}}\right)+\Omega\left(F_{\text{цг}},T_{\text{цг}},Q_0,P\right). \end{aligned} \quad (9)$$

Рівняння (9) є математичною моделлю триполичного реактора з вбудованим теплообмінником. Слід відмітити, що отримана модель має четвертий порядок, а отже розв'язок рівняння (9) може бути наведений через коефіцієнти рівняння. У цьому рівнянні значення функції $\Omega\left(F_{\text{цг}},T_{\text{цг}},Q_0,P\right)$

залежить від збурювальних параметрів. Зважаючи на те, що технологічні параметри, що входять в модель (9), доступні для вимірювання, їх значення можуть бути виміряні й підставлені в рівняння (9). Таким чином з'являється можливість постійного перерахунку моделі з метою отримання теоретичного значення концентрації Q_3 цільового компонента на виході триполичного газового реактора. У випадку, якщо розраховане значення відхиляється від виміряного на величину більшу, ніж задана (визначається, наприклад похибкою вимірювального каналу концентрації), математичну модель коректують, обчислюючи значення коефіцієнтів a_4, a_3, a_2, a_1 і a_0. Для цього можна використати, наприклад, метод найменших квадратів [7].

Висновки

Запропоновано комбіновану математичну модель триполичного газового реактора для виробництва аміаку. Отримана математична модель має четвертий порядок, що дозволяє достатньо просто отримати функціональну залежність концентрації Q_3 цільового компонента на виході триполичного газового реактора від вхідних регулювальних і збурювальних параметрів. Це рівняння може бути використано як критеріальне рівняння під час розв'язання оптимізаційної задачі. Розв'язком оптимізаційної задачі є значення витрат холодних байпасів, за яких у певних умовах концентрація Q_3 цільового компонента на виході реактора буде максимальною.

Запропонована математична модель може бути використана для побудови системи управління триполичним газовим реактором з моделлю у виробництві аміаку.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

[1] Д. Абдалхамид, М. Г. Лория, А. Б. Целищев, та П. І. Єлисєєв, «Система екстремального керування многополичним реактором з моделлю», *Вісник СНУ*, № 15 (186), ч. 2, с. 152-156с, 2012.

[2] А. Б. Целищев, П. І. Єлисєєв, М. Г. Лория, та І. І. Захаров, *Математичне моделювання технологічних об'єктів*. Луганськ: вид-во У ВНУ, 2011, 421 с.

[3] А. В. Иванов, «Разработка и моделирование цифровой системы многосвязного управления процессом синтеза аммиака.» дис. канд. техн. наук. Воронеж, Россия, 2009.

[4] М. В. Ананьєв, О. Б. Целіщев, та М. Г. Лорія, «Ідентифікація параметрів моделі з використанням точок глобальних екстремумів динамічних характеристик», *Вопросы химии и химической технологи*, № 5, с. 188-191, 2012.

[5] Є. М. Бромберг, К. Л. Куликовский, *Тестові методи підвищення точності вимірів*. М.: Енергія, 1978, 176 с.

[6] Д. Абдалхамід, М. Г. Лорія, О. Б. Целіщев, П. І. Єлісєєв, та І. І.Захаров, «Адаптація математичної моделі реактора синтезу метанолу» *Східноєвропейський журнал передових технологій*, № 6/3 (66), с. 4-6, 2013.

[7] М. В. Ананьєв, О. Б. Целіщев, М. Г. Лорія, «Оптимальне настроювання регулятора за квадратичною оптимізаційною функцією», *Вісник Східноукраїнського національного університету імені Володимира Даля*, № 6 (148), ч. 2, с. 134-141, 2010.

Рекомендована кафедрою теплоенергетики ВНТУ

Стаття надійшла до редакції 28.12.2018

Лорія Марина Геннадіївна — канд. техн. наук, доцент, кафедри електронних апаратів, e-mail: atp01@ukr.net .

Східноукраїнський національний університет імені Володимира Даля, Сєвєродонецьк

M. H. Loriia[1]

Combined Mathematical Model of Three-Shell Gas Reactor in Ammonia Production

[1]Volodymyr Dahl East Ukrainian National University, Severodonetsk

A method for developing a mathematical model for further optimization and control of a complex technological object is proposed. The analysis of the technological process of ammonia synthesis as a control object was carried out and an information-logic scheme of a three-shelf gas reactor with an integrated heat exchanger was developed. A mathematical model of an ammonia synthesis gas reactor shelf has been developed. A mathematical model of a gas reactor for ammonia synthesis has been developed. To determine the unknown parameters of the mathematical model, a system of test effects on a three-shelf gas reactor was proposed by changing the flow rates of synthesis gas from cold bypasses by a known fixed value. The development of a mathematical model involves two stages. At the first stage, a model is developed based on the

material and heat balances of each shelf of the three shelving gas reactors. Despite its low accuracy, it makes it possible to evaluate the type of criterion function in a wide range of variation of arguments, taking into account its multi-extremes, and to highlight the area of global extremum. At the second stage, the model is adapted based on experimental data obtained from the control object, based on probabilistic methods. This allows to ensure the accuracy of the parameters modeled by taking into account all disturbing influences. The resulting mathematical model has the fourth order; it is quite simple to obtain the functional dependence of the concentration of the target component at the output of the three-shelf gas reactor on the input control and perturbing parameters. The proposed equation can be used to solve the optimization problem. The mathematical model developed can be used to build a control system for a three-shelf gas reactor in ammonia production with a model.

Keywords: ammonia production, gas reactor, mathematical model, information-logical schema, test inputs.

Loriia Maryna H. — Cand. Sc. (Eng.), Associate Professor, Associate Professor of the Chair of Electronic Apparatus, e-mail: atp01@ukr.net

М. Г. Лория[1]

Комбинированная математическая модель трехполочного газового реактора в производстве аммиака

[1]Восточноукраинский национальный университет имени Владимира Даля, Северодонецк

Предложен способ разработки математической модели для дальнейшей оптимизации и управления сложным технологическим объектом. Выполнен анализ технологического процесса синтеза аммиака как объекта управления и разработана информационно-логическая схема трехполочного газового реактора со встроенным теплообменником. Разработаны: математическая модель полки газового реактора синтеза аммиака, математическая модель внутреннего теплообменника, математическая модель газового реактора синтеза аммиака. Для определения неизвестных параметров математической модели предложена система тестовых воздействий на трехполочный газовый реактор путем изменений расходов синтез-газа по холодным байпасам на известную фиксированную величину. Разработка математической модели включает два этапа. На первом этапе на основе материальных и тепловых балансов каждой полки трехполочного газового реактора разрабатывается детерминированая модель. Несмотря на ее невысокую точность, она дает возможность оценить вид критериальной функции в широком диапазоне изменения аргументов с учетом ее многоэкстремальности, и выделить область глобального экстремума. На втором этапе выполняется адаптация модели на основе экспериментальных данных, получаемых с объекта управления, на основе вероятностных методов. Это позволяет обеспечить точность параметров, моделируемых, за счет учета всех возмущающих воздействий. Полученная математическая модель имеет четвертый порядок, позволяет достаточно просто получить функциональную зависимость концентрации целевого компонента на выходе трехполочного газового реактора от входных регулирующих и возмущающих параметров. Предложенное уравнение может быть использовано для решения оптимизационной задачи. Предложенная математическая модель может быть использована для построения системы управления трехполочным газовым реактором с моделью в производстве аммиака.

Ключевые слова: производство аммиака, газовый реактор, математическая модель, информационно-логическая схема, тестовые воздействия.

Лория Марина Геннадиевна — канд. техн. наук, доцент, доцент кафедры электронных аппаратов, e-mail: atp01@ukr.net