

## ДИНАМІЧНА МОДЕЛЬ ГАЗОВОГО РЕАКТОРА

*У роботі розглядається питання розробки математичної моделі, яку можна застосовувати як для оптимізації технологічного процесу, так і для автоматизованої системи регулювання. Адаптація моделі буде забезпечувати ефективність обох стратегій керування. Отримана динамічна модель дозволяє адекватно описати характер зміни параметрів у діапазоні, які значно перевищує регламентні границі. Це особливо важливо при застосуванні її в системах контролю безпеки реактора й технологічних тренажерах.*

*Ключові слова: Математична модель, адаптація моделі, реактор, автоматизована система регулювання, оптимізація.*

D. ABDALHAMID, M. G. LORIYA, A. B. TSELYSCHEV

Technological Institute of East-Ukrainian National University named after Vladimir Dal, Severodonetsk

### DYNAMIC MODEL OF GAS REACTOR

*Abstract - In this article examined questions of development of mathematical model, that can be applied both for optimization of technological process and for the automatic system of adjusting.*

*Adaptation of model will provide efficiency of both strategies of management. Presence of generous amount difficult chemical-technological equipment and various processes substantially complicates the design of all complex on the whole. Therefore logically to begin with forming of dynamic model of gas reactor which basic processes of synthesis of methanol are in. Chemical processes which take place in a reactor are also characterized the large degree of complication, that is why a task of development of mathematical model of all basic processes taking into account their dynamics is substantially non-trivial. Creation of model of difficult physical and chemical process is, as a rule, by an iteration process, when functioning of mathematical model is constantly evened with the parameters of the real process and accordingly adjusted.*

*The result dynamic model allows adequately to describe character of change of parameters in a range, considerably exceeds regulation borders that. It is special it is important at application of her in the checking of safety of reactor systems and technological trainers.*

*Keywords: Mathematical model, adaptation of model, reactor, automatic system of adjusting, optimization.*

#### Вступ

Синтез метанолу – один із широко застосовуваних у промисловості способів переробки вуглеводневої сировини й зокрема природного газу. Щорічно зростає попит на метанол як сировину для одержання формальдегіду, амінів, оцтової кислоти, розчинників і т.ін. Каталітичний синтез метанолу з оксиду вуглецю й водню в цей час є практично єдиним промисловим методом одержання метанолу, а всі використовувані в цей час процеси відрізняються друг від друга варіантами технологічних схем, метою яких є досягнення максимальної ефективності використання ресурсів. Проблема підвищення ефективності даного процесу багаторазово досліджувалася [1].

Важливою проблемою промислового виробництва метанолу із синтез-газу є підвищення технологічної та економічної ефективності цього процесу. Поряд з методами розв'язання цієї проблеми за рахунок впровадження нових каталізаторів та вдосконалювання конструкцій реакторного обладнання, широко застосовується оптимізація технологічних параметрів процесу синтезу метанолу.

Окреме місце займає задача ефективного регулювання процесом та вироблення оптимальної стратегії зміни технологічних параметрів. Розв'язання цієї задачі вимагає розробку математичної моделі, яка відображає динаміку процесу з високою ступеню адекватності в широкому діапазоні зміни параметрів.

#### Основна частина

Процес синтезу метанолу проводиться за циркуляційною схемою, що дозволяє досягати значної ступені конверсії синтез-газу. Основою технологічної схеми є реактор поличного типу з байпасом «холодного» газу. На рис. 1 наведена схема такого реактора.

Виробництво метанолу відрізняється відносно високою складністю й різноманіттям параметрів, що впливають на хід процесу, складною кінетикою хімічних реакцій, розподіленістю і нелінійністю параметрів процесу як об'єкта моделювання. Існуюче виробництво є високо автоматизованим, однак керування процесом ведеться за алгоритмами, які не враховують зміни параметрів реактора у часі.

У зв'язку із цим постає питання розробки математичної моделі (ММ), яка була би застосовуваною як для оптимізації технологічного процесу, так і для автоматизованої системи регулювання. У цьому випадку адаптація моделі буде забезпечувати ефективність обох стратегій управління. Крім того, динамічну модель можна застосовувати у системи навчання і тренування обслуговуючого персоналу, а також підвищення безпеки роботи реактора. [2-4]

Наявність великої кількості складного хіміко-технологічних обладнання і різноманітних процесів суттєво ускладнює моделювання всього комплексу в цілому. Тому логічно почати з формування динамічної моделі газового реактора, у якому й відбуваються основні процеси синтезу метанолу. Хімічні процеси, що відбуваються в реакторі, також характеризуються великим ступенем складності, тому задача розробки математичної моделі всіх основних процесів з урахуванням їх динаміки є суттєво нетривіальною.

Створення моделі складного фізико-хімічного процесу є, як правило, ітераційним процесом, коли

функціонування розроблювальної математичної моделі постійно зрівнюється з параметрами реального процесу й відповідно корегується. [5,6]

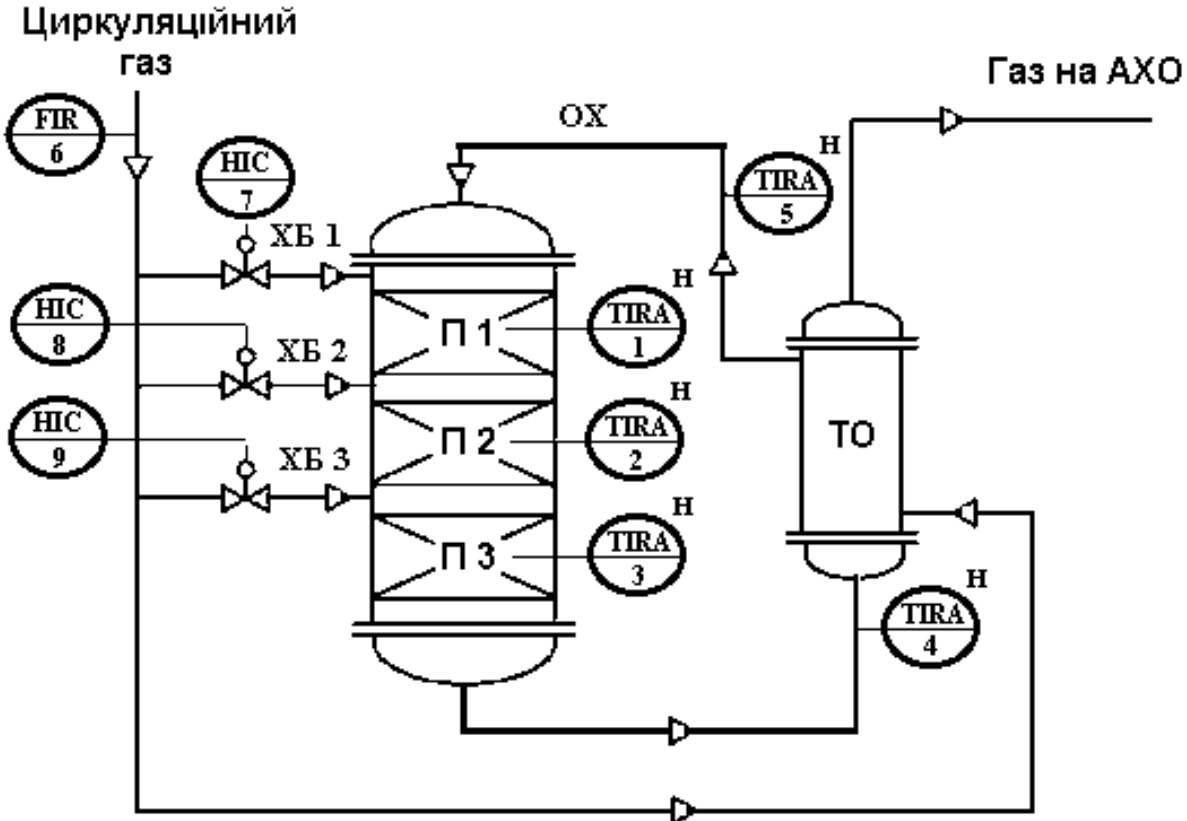


Рис.1. Схема багато полицного газового реактора із вбудованим теплообмінником  
 ТО – теплообмінник; П1, П2, П3 – перша, друга і третя полиці із каталізатором; ОХ - потік основного ходу синтез - газу; ХБ1, ХБ2, ХБ3 – потоки «холодних» байпасів синтез - газу на відповідні полиці реактора; АХО – аміачно-холодильне відділення; TIRA 1-6 - прилади контролю температури; FIR - 7 – прилад контролю витрати синтез - газу; NIS 8-10 – панелі дистанційного керування електричними засувками.

При цьому необхідне застосування знань із різних наукових областей, зокрема, необхідно враховувати:

- фізичні закони збереження речовини, енергії і імпульсу;
- термодинамічні властивості речовин;
- хімічні механізми і кінетику реакцій.

У реакторі, що розглядається, тиск стабілізується роботою компресора синтез-газу. Тому, тиск не є регульованою величиною, а може бути віднесений до збурюючого фактору. При керуванні газовими реакторами достатньо регулювати температуру, а концентрацію можна оцінити використовуючи математичну модель процесу. Регулюючим параметром для кожної полиці є витрата синтез-газу за «холодним» байпасом.

Всі інші параметри процесу є збурюючими координатами. До них слід віднести температури вхідних потоків  $T_1$  та  $T_2$  та концентрації  $Q_1$  та  $Q_2$  у них цільового компоненту. Інформаційно-логічна схема газового реактора наведена на рис. 2.

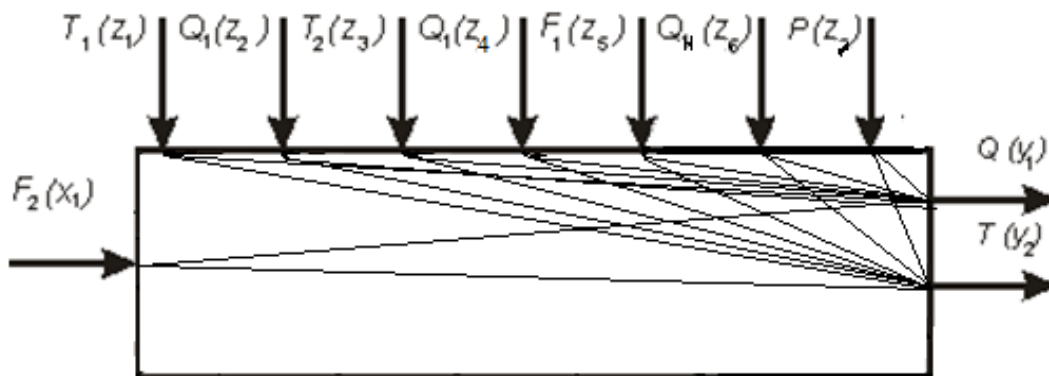


Рис.2. Інформаційно-логічна схема полиці колони синтезу метанолу

Також слід відмітити, що вихідні координати газового реактора є взаємопов'язаними. Так, наприклад, зміна температури  $T$  в реакторі з одного боку відповідно до закону Ле Шательє змінить кількість речовини, що утворюється, тобто викличе зміну концентрації  $Q$ . З цього випливає, що зміна будь-якої з вхідних координат (регулюючої або збурюючої) викличе зміну відразу всіх вихідних координат.

Для визначення ММ газового реактора слід скласти дві часткові моделі: за концентрацією  $Q$  цільового компоненту та за температурою  $T$ . Складемо ці часткові ММ.

Розглянемо складання часткової ММ за концентрацією  $Q$  метанолу, що утворюється в реакції (цільового компоненту). Складемо рівняння матеріального балансу за цільовим компонентом (компонентом, що утворюється в реакції). Цільовий компонент надходить в реактор із першим та з другим потоком (наприклад, у технологічних схемах із рециклом), утворюється в реакторі в наслідок реакції, накопичується в реакторі та відводиться з потоком, який виходить, із реактора.

Рівняння матеріального балансу за цільовим компонентом має вигляд.

$$dm_1 + dm_2 + dm_p = dm_v + dm, \quad (1)$$

де  $dm_1 = F_1 Q_1 dt$  – маса цільового компоненту, що потрапляє в реактор із першим потоком;  $dm_2 = F_2 Q_2 dt$  – маса цільового компоненту, що потрапляє в реактор із другим потоком;  $dm_p = \rho V K_0 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)(Q - Q_n) \frac{P}{P_0} dt$  – маса цільового компоненту, що утворюється в реакції;  $dm_v = \rho V dQ$  – маса цільового компоненту, яка накопичується в реакторі об'ємом  $V$ ;  $dm = (F_1 + F_2) Q dt$  – маса цільового компоненту, що відводиться з реактора.

В рівнянні (1)  $F_1$  – витрата потоку першого реагенту,  $\frac{\kappa\mathcal{L}}{c}$ ;  $F_2$  – витрата потоку другого реагенту,  $\frac{\kappa\mathcal{L}}{c}$ ;  $\rho$  – густина газової суміші в реакторі (визначається з рівняння Менделєєва-Клапейрона),  $\frac{\kappa\mathcal{L}}{M^3}$ ;  $V$  – вільний об'єм газового реактора,  $M^3$ ;  $K$  – швидкість хімічної реакції,  $\frac{1}{c}$ ;  $Q_1$ ,  $Q_2$ , та  $Q$  – концентрація цільового компоненту на входах та на виході з реактора відповідно, *мас. частка*;  $T$  – температура у реакторі,  $K$ ;  $R$  – універсальна газова стала,  $\frac{Дж}{\text{моль} \cdot K}$ ;  $E$  – енергія активації,  $\frac{Дж}{\text{моль}}$ .

Рівняння матеріального балансу в технологічних змінних набуде вигляду

$$F_1 Q_1 dt + F_2 Q_2 dt + \rho V K_0 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)(Q - Q_n) \frac{P}{P_0} dt = \rho V dQ + (F_1 + F_2) Q dt. \quad (2)$$

Після лінеаризації, вилучення рівняння статички та переходу до безрозмірних координат

$$\left(\frac{\Delta Q}{Q_0} = y_1; \frac{\Delta T}{T_0} = y_2; \frac{\Delta P}{P_0} = y_3; \frac{\Delta F_1}{F_{10}} = x_1; \frac{\Delta F}{F_0} = \frac{\Delta S}{S_0} = x_2; \frac{\Delta T_1}{T_{10}} = z_1; \frac{\Delta Q_1}{Q_{10}} = z_2; \frac{\Delta T_2}{T_{20}} = z_3; \frac{\Delta Q_2}{Q_{20}} = z_4; \frac{\Delta F_2}{F_{20}} = z_5; \frac{\Delta Q_n}{Q_{n0}} = z_6; \frac{\Delta P}{P_0} = z_7\right), \text{ отримуємо рівняння:}$$

$$\tau_1 \frac{dy_1}{dt} + y_1 = K_{11} x_1 + K_{12} z_2 + K_{13} z_4 + K_{14} z_5 + K_{15} z_6 + K_{16} y_2, \quad (3)$$

де  $\tau_1 = \frac{\rho V Q_0}{\Pi_1}$  – стала часу,  $c$ ;  $\Pi_1 = Q_1 \left[ F_1 + F_2 - \rho V K_0 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)(Q - Q_n) \frac{P}{P_0} \right]$ ;  $K_{11} = \frac{(Q - Q_2) F_{20}}{\Pi_1}$  –

коефіцієнт;  $K_{12} = -\frac{Q_1 F_1}{\Pi_1}$ ;  $K_{13} = -K_{14} = -\frac{Q_2 F_2}{\Pi_1}$ ;  $K_{15} = \frac{\rho V K_0 \exp\left(-\frac{E}{RT_0}\right) Q_n}{\Pi_1} \frac{P}{P_0}$  – коефіцієнт;

$K_{16} = \frac{E}{RT_0} \frac{\rho V K_0 \exp\left(-\frac{E}{RT_0}\right)(Q - Q_n)}{\Pi_1} \frac{P}{P_0}$  – коефіцієнт.

Рівняння (3) є частковою динамічною ММ газового реактора за концентрацією цільового компоненту без урахування часу запізнення. [7,8]

Для того щоб розробити часткову математичну модель газового реактора за температурою, слід скласти рівняння теплового балансу. Тепло в реактор надходить із потоками реагентів, виділяється у процесі

реакції. Це тепло накопичується в об'ємі реактора та виходить із нього з потоком  $F_1 + F_2$ . При розрахунку ММ вважаємо, що втрата тепла у навколишнє середовище незначна та нею можна нехтувати. Отже рівняння теплового балансу матиме вигляд

$$dq_1 + dq_2 + dq_p = dq_v + dq, \quad (4)$$

де  $dq_1 = F_1 c_1 T_1 dt$  – кількість тепла, що надходить із першим потоком;  $dq_2 = F_2 c_2 T_2 dt$  – кількість тепла, що надходить із другим потоком;  $dq_p = r \rho V K (Q - Q_n) \frac{P}{P_0} dt$  – кількість тепла, що виділяється в наслідок реакції;  $dq_v = \rho V c dT$  – кількість тепла, що накопичується у реакторі;  $dq = (F_1 + F_2) c T dt$  – кількість тепла, що виходить із реактора.

В рівнянні (4):  $c_1, c_2, c$  – теплоємність вхідних та вихідного потоку,  $\frac{Дж}{кг K}$ ;  $T_1, T_2, T$  – температура вхідних та вихідного потоку,  $K$ ;  $r$  – питома теплота реакції,  $\frac{Дж}{кг}$ ;  $dT$  – зміна температури у реакторі,  $K$ .

Після лінеаризації, вилучення рівняння статички та переходу до безрозмірного вигляду маємо:

$$\tau_2 \frac{dy_2}{dt} + y_2 = K_{21} x_1 + K_{22} z_1 + K_{23} z_3 + K_{24} z_5 + K_{25} z_6 + K_{26} z_7 + K_{27} y_1, \quad (5)$$

де  $\tau_2 = \frac{\rho V c T_0}{\Pi_2}$  – стала часу, с;  $\Pi_2 = \left[ (F_{10} + F_{20}) c T_0 - \frac{E}{RT_0} r \rho V K_0 \exp\left(-\frac{E}{RT_0}\right) (Q_0 - Q_{n0}) \frac{P}{P_0} \right]$ ;

$K_{21} = \frac{(c_2 T_{20} - c T_0) F_{20}}{\Pi_2}$  – коефіцієнт;  $K_{22} = \frac{F_{10} c_1 T_{10}}{\Pi_2}$  – коефіцієнт;  $K_{23} = \frac{F_{20} c_2 T_{20}}{\Pi_2}$  – коефіцієнт;

$K_{24} = \frac{F_{10} (c_1 T_{10} - c T_0)}{\Pi_2}$  – коефіцієнт;  $K_{25} = -\frac{r \rho V K_0 \exp\left(-\frac{E}{RT_0}\right) Q_{n0} \frac{P}{P_0}}{\Pi_2}$  – коефіцієнт;

$K_{26} = \frac{r \rho V K_0 \exp\left(-\frac{E}{RT_0}\right) (Q_0 - Q_{n0}) \frac{P}{P_0}}{\Pi_2}$  – коефіцієнт;  $K_{27} = \frac{r \rho V K_0 \exp\left(-\frac{E}{RT_0}\right) Q_0 \frac{P}{P_0}}{\Pi_2}$  – коефіцієнт.

Рівняння (5) є частковою динамічною математичною моделлю газового реактора за температурою.

Аналізуючи отримані часткові ММ газового реактора, слід зробити висновок, що вихідні координати є взаємозалежними. Рівняння (3) та (5) утворюють систему рівнянь. Для того, щоб виключити залежність однієї вихідної координати від інших, слід розв'язати систему рівнянь (6).

$$\begin{cases} \tau_1 \frac{dy_1}{dt} + y_1 = K_{11} x_1 + K_{12} z_2 + K_{13} z_4 + K_{14} z_5 + K_{15} z_6 + K_{16} y_2 \\ \tau_2 \frac{dy_2}{dt} + y_2 = K_{21} x_1 + K_{22} z_1 + K_{23} z_3 + K_{24} z_5 + K_{25} z_6 + K_{26} z_7 + K_{27} y_1 \end{cases} \quad (6)$$

Система рівнянь (6) може бути розв'язана будь-яким методом. Це можна зробити використовуючи, наприклад, матричний метод розв'язання системи рівнянь, як це було показано раніше.

Аналогічним чином складаються системи рівнянь для другої та третьої полиць реактора. Ці три системи рівнянь сумісно з математичною моделлю внутрішнього теплообмінника, який являє собою кожухотрубчастий теплообмінник (вивід динамічної математичної моделі наведений в [5]), складають математичну модель колони синтезу метанолу у виробництві метанолу.

### Висновки

Отримана динамічна модель дозволяє адекватно описати характер зміни параметрів у діапазоні, якій значно перевищує регламентні межі. Це особливо важливо при застосуванні її у системах контролю безпеки реактора та технологічних тренажерах. Урахування в моделі процесу хімічної реакції дозволяє контролювати такий складний параметр як зміна активності каталізатора. Цей показник є дуже важливим при визначенні необхідності адаптації моделі. Адаптація моделі одночасно забезпечує її адекватність як у системі оптимізації, так і у автоматизованій системі регулювання.

## Література

1. Амелин А.Г. Общая химическая технология [Текст] / А.Г.Амелин, А.М.Кутепов – М.: Химия, 1977. – 324 с.
2. Стенцель Й.І. Автоматизація технологічних процесів хімічних виробництв: Підручник [Текст] / Й.І. Стенцель, О.В. Поркуян - Луганськ: вид-во Східноукр. нац. ун-ту ім. В. Даля, 2010. – 300 с.
3. Математичне моделювання технологічних об'єктів [Текст] : Підручник / О.Б.Целищев, П.Й.Єлісеєв, М.Г.Лорія, І.І.Захаров – Луганськ. Вид-во Східноукр. нац. унів. ім. В. Даля, 2011. – 421 с.
4. Принципы математического моделирования химико-технологических систем [Текст] / В.В.Кафаров, В.Л.Перов, В.П.Мешалкин и др.– М.: Химия, 1974. - 344 с.
5. Spatial Self-Organization in One Process of Chemical Technology [Text] : International Conference on Differential Equations and Dynamical Systems., 1-4 August 1997. Canada. Waterloo : 1997. - P. 166.
6. Thermal Spots in an Industrial Packed Bed Catalytic Reactor [Text] : Year 2000 International Conference on Dynamical Systems and Differential Equations (ICDSDE) Abstracts Book. USA, Kennesaw, 2000. - P.81.
7. Абдалхамид, Д. Система екстремального управління многополочным реактором с моделью [Текст] / Д.Абдалхамид, М.Г.Лорія, А.Б.Целищев, П.И.Елисеєв // Вісник СХУ. - 2012. - №15(186). - ч.2. - С.152-156.

## References

1. Amelin A.G., General chemical technology. (1977). Moscow, USSR:Higher school, 448c.
2. Stentsel Y.I., (2010). *Avtomatyzatsiia tekhnologichnykh protsesiv khimichnykh vyrobnytstv, Pidruchnyk* [Automation of technological processes of chemical production, Textbook], Luhansk, vyd-vo Skhidnoukr. nats. uh-tu im. V. Dalia, , 300 p.
3. Tselishchev O.B. (2011), *Matematychni modelyuvannia tekhnologichnykh obektiv* [Mathematical modeling of technological objects], Luhansk. Vyd-vo Skhidnoukr. nats. uh-tu im. V. Dalia, 421 p.
4. Kafarov V.V., (1974).Principles of mathematical design of the chemical-technological systems. Moscow, USSR:Chemistry,. 344 p.
5. Spatial Self-Organization in One Process of Chemical Technology [Text] : International Conference on Differential Equations and Dynamical Systems., 1-4 August 1997. Canada. Waterloo : 1997. - P. 166.
6. Thermal Spots in an Industrial Packed Bed Catalytic Reactor [Text] : Year 2000 International Conference on Dynamical Systems and Differential Equations (ICDSDE) Abstracts Book. USA, Kennesaw, 2000. - P.81.
7. D.Abdalhamid, (2012).System extreme management by a multishelf of Reactor with the model / D.Abdalhamid, Loria M.G., Tselishchev O.B., Yelisiyev P.Y., // Visnik SNU. - №15(186). - p.2. p.152-156p.

Рецензія/Peer review : 7.11.2013 р.

Надрукована/Printed :21.12.2013 р.

Рецензент: Рязанцев О.І., д.т.н., проф. професор каф. комп'ютерної інженерії, Технологічний інститут Східноукраїнського національного Університету ім. Володимира Даля, м. Сєвєродонецьк