

## ОСОБЕННОСТИ УНИФИЦИРОВАННОГО ПРЕДСТАВЛЕНИЯ МОДЕЛЕЙ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ СЛОЖНЫХ ХИМИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДСТВ

Забровский С.В.  
Кафедра ЭВМ ДонНТУ

### **Abstract**

*Zabrovsky S.V., Features of compatible presentation of difficult chemical productions technological processes models. The principles of chemical production technological process model construction are discussed in article. Universal approach to models development is offered.*

### **Введение**

Повышение мощности вычислительных средств позволило проводить моделирование сложных химических процессов с существенно более высокой степенью достоверности. Однако возросшая сложность самих математических моделей затрудняет процесс практической реализации этих моделей, поэтому встал вопрос об унификации представления моделей технологических процессов сложных химических производств, что, в частности, позволит облегчить в дальнейшем разработку соответствующего параллельного решателя.

### **Построение модели производства уксусной кислоты**

В настоящее время основным методом промышленного производства уксусной кислоты является процесс карбонизации метанола с родиевым катализатором. Производство уксусной кислоты на предприятии характеризуется относительно высокой степенью автоматизации при полном отсутствии, однако, какой-либо модельной поддержки, что в современных условиях считается существенным недостатком. В связи с этим возникает задача разработки соответствующего модельного обеспечения.

Рассмотрим процесс разработки модели технологического процесса производства уксусной кислоты [1-3]. Упрощенная схема технологического процесса представлена на рис. 1. Уксусная кислота получается из метанола, поступающего из F102, смешанного с легкими фракциями (кислая вода), возвращаемыми из колонны отгонки легких фракций kol1 и колонны обезвоживания kol2, а также с тяжелой фракцией

декантатора DEKA2 (метил иодид) и окиси углерода, вдуваемой в реактор из F101, в газожидкостном реакторе REAK6 с механическим перемешиванием в присутствии катализатора и активатора при температуре  $185^{\circ}\text{C}$  и давлении 28 атм. Катализатором процесса является карбонил родия. Одним из главных условий сохранения карбонильного комплекса является парциальное давление окиси углерода в растворе, что определяет общее давление газов в реакторе в пределах 27-29 атм [4].

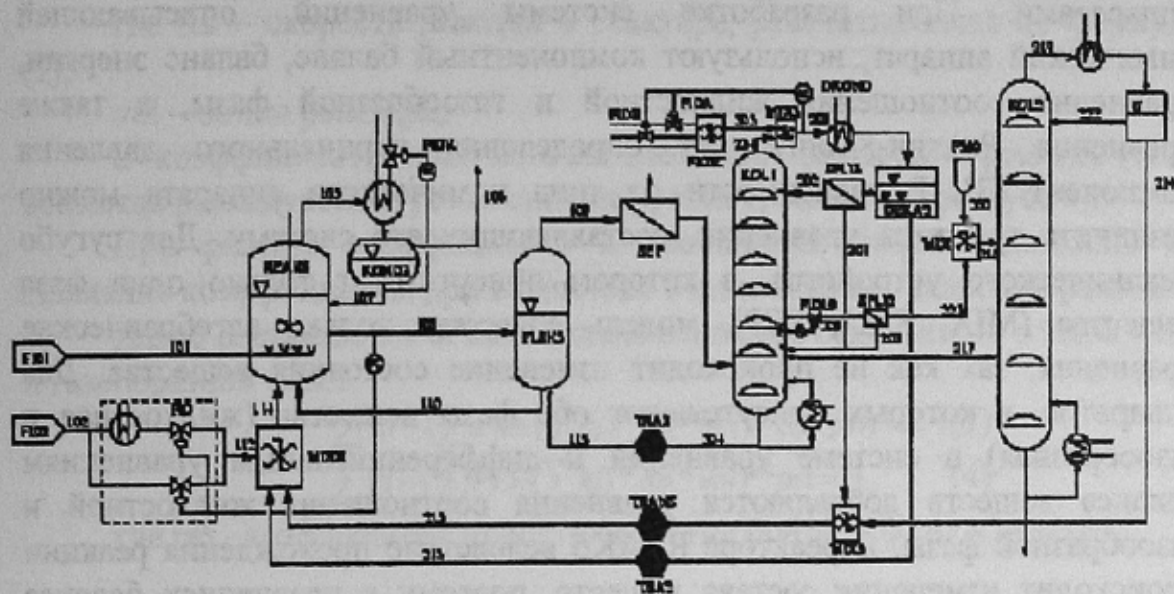


Рис. 1 - Технологическая схема процесса производства уксусной кислоты.

Активатором (промотором) катализатора служат йодистый метил и йодистый водород. Температурой и концентрацией веществ в реакторе управляют возвращаемым потоком из kol1 и kol2. В возвращаемых потоках также содержатся отделенные от конечного продукта вода, метил иодид и родий. Возвращаемая в реактор часть потока составляет 80% от прореагировавшего вещества, поэтому он оказывает весьма существенное влияние на протекание реакции, что должно учитываться при построении и распараллеливании модели. Работа реактора рассчитана на полное превращение метанола и отсутствие его в продуктах реакции. Для обеспечения стабильности управления процессом рабочая скорость процесса принята равной 65,5 % от максимальной теоретической, т.е. фактическая скорость реакции ограничена скоростью подачи метанола и равна ей [2].

Аппараты, расположенные по технологической схеме за реактором, служат в основном для очистки и отгонки уксусной кислоты от остальных реакционных примесей. Сепаратор потока реактора отделяет и возвращает в реактор родий и большую часть уксусной кислоты. Далее колонна kol1 отгоняет легкие фракции (метил иодид и воду, которые разделяются далее деkantатором DEKA2), колонна сушки kol2, отгоняет воду, а уксусная



кислота в виде тяжелой фракции собирается в низу колонны как готовый продукт.

Для построения модели данного технологического процесса, необходимо разбить его на блоки, согласно схеме реального производства, т.е. составить системы дифференциально-алгебраических уравнений для реактора, конденсатора, колонн, а связи между ними обеспечить в виде набора переменных, описывающих потоки в трубопроводах между аппаратами. При разработке системы уравнений, описывающей химический аппарат, используют компонентный баланс, баланс энергии, уравнения соотношения жидкостной и газообразной фазы, а также уравнения Редлич-Квонга для определения парциального давления компонент [3]. В зависимости от типа химического аппарата можно различить три типа уравнений, составляющих его систему. Для сугубо механического устройства, в котором присутствует только одна фаза вещества (MIX, SPLI, SEP), модель содержит только алгебраические уравнения, так как не происходит изменение состояния вещества. Для аппаратов, в которых присутствуют обе фазы вещества (жидкостная и газообразная) в системе уравнений к дифференциальным уравнениям баланса веществ добавляются уравнения соотношения жидкостной и газообразной фазы. В реакторе REAK6 вследствие прохождения реакции происходит изменения состава веществ, поэтому в уравнениях баланса вещества добавлено слагаемое, описывающее поведение вещества в реакции: расход или синтез вещества с заданной скоростью.

Рассмотрим построение системы уравнений модели с сосредоточенными параметрами для реактора REAK6. Схематично реактор можно представить в виде, представленном на рис. 2.

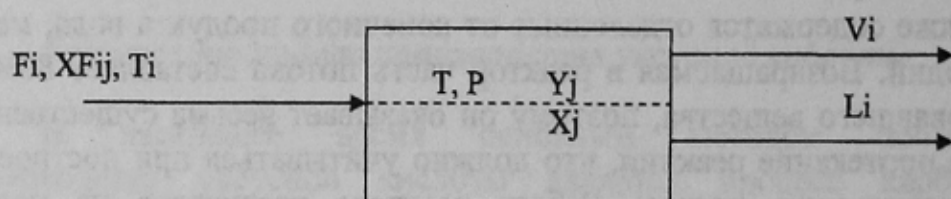


Рис. 2 Схематичное представление химического аппарата

где

$F_i$  – поток  $i$ -го входа в реактор (кмоль/с);

$T_i$  – температура  $i$ -го входа в реактор (К);

$X_{Fij}$  – концентрация вещества  $j$  в  $i$ -ом входе в реактор;

$T, P$  – температура и давление в реакторе;

$L_i$  – поток жидкости на  $i$ -ом выходе реактора;

$V_i$  – поток газообразный на  $i$ -ом выходе реактора;

$X_j$ ,  $Y_j$  – концентрация вещества  $j$  в жидкой и газообразной фазе соответственно.

Запишем уравнение баланса вещества (для каждого  $X_j$  жидкой фазы реактора):

$$\frac{dX_j}{dt} = (\sum L_i) * X_j + (\sum V_i) * Y_j - \sum F_i * X_{Fij} + k_j * R_o * vol, \quad (2)$$

где  $R_o$  – скорость реакции в реакторе, рассчитываемая по формуле (1);

$vol$  – объем реактора;

$k$  – коэффициент, описывающий поведение вещества в реакции (если вещество расходуется –1, если синтезируется 1, если не участвует 0).

При расчете коэффициента  $k$  необходимо также принимать во внимание коэффициенты при веществах в химическом уравнении реакции.

Далее составляется общий баланс вещества отдельно по жидкостной и газообразной фазе:

$$\sum L_i - (\sum F_i + (\sum k_j) * R_o * vol) * (1 - psi) = 0 \quad (3)$$

$$\sum V_i - (\sum F_i + (\sum k_j) * R_o * vol) * psi = 0, \quad (4)$$

где  $psi$  – коэффициент присутствия газообразной фазы в реакторе.

Для включения в систему температуры  $T$  в реакторе необходимо составить энергетический баланс [3]. Для его составления рассчитываются энтальпии (теплосодержание) каждого из входящих и выходящих потоков реактора:

$$h_{li} = \sum_j X_{Fij} * h_{glij},$$

где  $h_{li}$  – энтальпия  $i$ -го входа в реактор;

$h_{glij}$  – энтальпия  $j$ -ой компоненты на  $i$ -ом входе в реактор, рассчитываемая по формуле определения изменения теплосодержания вещества при температуре  $T_i$  от энтальпии вещества при температуре  $T_o$ , используя коэффициенты теплоемкости.

Энтальпия выходных потоков определяется таким же образом, однако отдельно для жидкой ( $h_{mli}$ ) и газообразной ( $h_{mgi}$ ) фазы. Энергетический баланс:

$$\frac{dh_{in}}{dt} = \sum_i F_i * h_{li} - \sum_i L_i * h_{mli} - \sum_i V_i * h_{mgi} \quad (5)$$

$$h_{in} - (1 - psi) * \sum_i h_{mli} - psi * \sum_i h_{mgi} = 0, \quad (6)$$

где  $h_{in}$  – энтальпия реактора в целом.

Для включения в систему уравнений баланса вещества для газообразной фазы реактора необходимо использовать уравнения

соотношения жидкой и газообразной фазы реактора для каждого компонента  $j$ .

$$Y_j * P * p_{hj} - X_j * g_{mj} * p_{spj} * p_{hsj} = 0 \quad (7),$$

где  $p_{hj}$ ,  $p_{hsj}$  – коэффициенты газообразной и насыщенной фазы  $j$ -ой компоненты.

Далее для полного описания реактора используют дополнительные уравнения для определения молярных объемов каждого компонента, и расчета коэффициента  $p_{si}$ , а так же соотношения для молярного объема реактора в целом.

После описания всех вышеперечисленных уравнений мы получим модель реактора в виде системы уравнений по одному для каждого неизвестного плюс уравнение для определения промежуточного коэффициента  $p_{si}$ . Данную схему построения модели можно использовать для любого химического аппарата, содержащего жидкую и газообразную фазу вещества или только жидкую. Однако необходимо учитывать тип процессов, происходящих в аппарате. Если в аппарате не происходит реакций, тогда исчезают слагаемые со скоростью реакции из компонентного баланса, а уравнение баланса энергии становится алгебраическим (нет изменения энергии за счет реакции). Если в аппарате присутствует только одна фаза вещества, тогда вся система уравнений становится алгебраической, по причине отсутствия преобразований веществ между фазами. Из вышесказанного можно сделать вывод, что для построения моделей остальных аппаратов и установок технологического процесса производства уксусной кислоты, можно использовать данные уравнения, а сам процесс построения модели можно унифицировать, что облегчает практическую имплементацию модели производства.

### **Разработка модели производства уксусной кислоты в среде моделирования DIVA**

Для упрощения практической разработки модели производства уксусной кислоты в конкретной среде моделирования, необходимо выделить компоненты технологического процесса, оказывающие наибольшее влияние на процесс [2, 3, 5-7]. Для разработки модели в системе DIVA [1] используются следующие компоненты:

- вода;
- метанол;
- уксусная кислота;
- промотор метил иодид;
- CO.

Далее определяются входные и выходные переменные каждого блока и набор переменных, описывающих перемещение вещества между блоками установки. Для описания модели в конечном итоге был принят



следующий набор переменных: общий поток вещества в трубе (кмоль/с)  $liq$  – для жидкости,  $var$  – для газа; молярная часть каждого компонента в трубе  $x$ , описывающая количество данного вещества в общем потоке; температура потока  $t$  (К) [3]. Максимальное число переменных на одном входе равно 7 (для 5 компонентов). Однако для точного описания модели самого реактора, необходимо учитывать концентрацию катализатора – родия. Так как в процессе реакции родий практически не расходуется и полностью возвращается в реактор из сепаратора потока реактора FLSH5, то он представлен в модели в виде константного значения концентрации в реакторе и в описании связей между REAK6 и FLSH5 и модели FLSH5 не присутствует, т.к. он не влияет сколь-нибудь существенно на баланс сепаратора потока FLSH5 по причине очень малой концентрации.

Для описания производительности кипятильников дистилляционных колонн и тепла, рассеиваемого конденсаторами, используют константный параметр изменения энтальпии вещества, вносимой данным аппаратом, который используется в уравнении баланса энергии.

Для практической разработки модели в системе моделирования DIVA в местах соединения труб реальной установки пришлось использовать дополнительные блоки – миксеры (MIX), с целью математического описания процесса идеального перемешивания вещества.

При разработке модели в системе моделирования выяснилось также, что описание всех блоков процесса с учетом присутствия в них всех 5-ти компонент становится весьма громоздким, особенно для дистилляционных колонн (так как там присутствуют 14 и 50 тарелок во второй и третьей колонне соответственно). Учитывая тот факт, что метанол и СО должны практически полностью прореагировать в реакторе или быть отведенными конденсатором KOND3, в блоках следующих за сепаратором потока реактора FLSH5 их концентрация минимальна, поэтому для упрощения систем уравнений остальных блоков применен абстрактный аппарат SEP, отсутствующий в реальном процессе и предназначенный в модели для удаления из потока в KOL1 метанола и СО. Для обратного преобразования потока при его возвращении в реактор или FLSH5 используется обратное преобразование потока с помощью трансформаторов TRA.

При реализации моделей дистилляционных колонн в системе моделирования DIVA они представляются в виде матрицы, содержащей входы и выходы каждого блока (тарелки колонны). Для тарелок расположенных рядом, входы и выходы соединяются со сдвигом для жидкой и газообразной составляющей, этим обеспечивается физический процесс движения жидкости вниз по тарелкам, а газа – вверх к отводу легкой фракции. Т.е. модель колонны представлена в виде совокупности моделей каждой тарелки, выходы которых соединены со сдвигом. В местах отбора вещества из колонны или орошения ее флегмой в реальном технологическом процессе, для уравнений соответствующих тарелок

добавляются входные или выходные переменные соответственно, причем выходные концентрации это просто повторение концентраций внутреннего состояния тарелки.

В результате разработанная модель производства уксусной кислоты в системе моделирования DIVA разбита на 29 блоков, с учетом блоков входной подачи вещества. Общее количество уравнений в полученной модели составляет 1230.

### **Представление модели в матрично-векторном виде**

Анализируя вышесказанное, а также опыт работы с моделью, реализованной в системе моделирования DIVA, можно сделать вывод о том, что модели различных блоков химического процесса можно унифицировать с целью облегчения дальнейших практических преобразований моделей и разработки новых, более быстродействующих имплементаций. Поэтому необходимо выработать специальное представление моделей химических установок, позволяющих достаточно легко производить различные действия над моделью, и унифицирующее дальнейшую разработку модели как в последовательном варианте, так и в параллельном. Под данные критерии идеально подходит матрично-векторное представление.

Тот факт, что все входы и выходы блоков описаны в виде набора переменных для каждого вещества, присутствующего в потоке, а также потоками каждого входа и выхода, мы можем для конкретного блока входные и выходные переменные концентраций веществ представить в виде матриц, а потоков - в виде векторов.

Пусть:  $V_{вх}$  – вектор входных потоков блока в виде  $\begin{pmatrix} F1 \\ F2 \\ \vdots \\ Fi \end{pmatrix}$ , для

каждого входа  $i$ .

$M_{вх}$  – матрица входных концентраций вещества  $j$  на входе  $i$ :

$$\begin{vmatrix} X_{11} & X_{21} & X_{i1} \\ X_{12} & X_{22} & X_{i2} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ X_{1j} & X_{2j} & X_{ij} \end{vmatrix}$$

$L_{iq}$  – вектор выходных потоков жидкой фазы вещества в химическом блоке,

$X_{liq}$  – вектор концентраций вещества  $j$  в жидкой фазе блока,

$V_{ар}$  – вектор выходных потоков газообразной фазы вещества в химическом блоке,

$X_{вар}$  – вектор концентраций вещества  $j$  в газообразной фазе блока.



$K$  – вектор коэффициентов участия веществ в химической реакции (при ее наличии, иначе 0). Тогда уравнение компонентного баланса для данного химического блока примет вид:

$$\frac{dX_{liq}}{dt} = M_{вв} * V_{вв} - X_{liq} * Liq - X_{vap} * Vap + K * R_0 * vol$$

Т.е. в матрично-векторном виде баланс жидкостной фазы представляется в виде одного уравнения, которое будет легко реализовываться с помощью языков программирования или моделирования.

Зависимость векторов полных потоков входов и выходов:

$$Liq = (V_{вв} + \sum K * R_0 * vol) * (1 - psi)$$

$$Vap = (V_{вв} + \sum K * R_0 * vol) * psi$$

Далее представим в матрично-векторном виде энергетический баланс блока:

$$\frac{dh_{innen}}{dt} = Ve * V_{вв} - Liq * h_{ml} - Vap * h_{mg},$$

где  $Ve$  – вектор энтальпий входных потоков в химическом блоке, он складывается из сумм удельных энтальпий веществ на каждом входе реактора (также можно представить в виде произведения матриц входных концентраций  $M_{вв}$  и удельных энтальпий веществ на входе, однако значимыми будут только результаты по диагонали матрицы);

$h_{ml}$  – энтальпия жидкой фазы в блоке,

$h_{mg}$  – энтальпия газообразной фазы в блоке.

На заключительном этапе необходимо включить в систему уравнений баланс вещества для газообразной фазы химического блока, используя уравнения соотношения жидкой и газообразной фазы для каждого компонента:

$$X_{vap} * P * PHI - X_{liq} * gamj * pspj * phsj = 0$$

В результате вышеприведенных преобразований мы получили упрощенную унифицированную модель абстрактного химического блока в матрично-векторном виде:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dX_{liq}}{dt} = M_{вв} * V_{вв} - X_{liq} * Liq - X_{vap} * Vap + K * R_0 * vol \\ Liq = (V_{вв} + \sum K * R_0 * vol) * (1 - psi) \\ Vap = (V_{вв} + \sum K * R_0 * vol) * psi \\ \frac{dh_{innen}}{dt} = Ve * V_{вв} - Liq * h_{ml} - Vap * h_{mg} \\ X_{vap} * P * PHI - X_{liq} * gamj * pspj * phsj = 0 \end{array} \right.$$

## Выводы

Использование полученной унифицированной системы уравнений математической модели позволит в дальнейшем существенно облегчить



построение параллельной модели технологического процесса производства уксусной кислоты, а также - сформировать достаточно универсальные подходы к разработке моделей сложных химико-технологических установок в различных моделирующих средах.

### **Литература**

1. Holl P., Marquardt W., Gilles E.D., DIVA – A Powerful Tool for Dynamic Process Simulation. *Comp. Chem. Eng.* 12 (1988), pp 421-425.
2. Аноприенко А. Я., Кинле А., Святный С. Н., Осипова Т. Ф., Моделирование реактора синтеза уксусной кислоты на базе моделирующей среды DIVA / В кн. "Информатика, кибернетика и вычислительная техника (ИКВТ-97). Сборник научных трудов ДонГТУ." Выпуск 1. Донецк, ДонГТУ, 1997, с. 16-21.
3. A.Kienle, F.Pfisterer, R.Waschler, S. Sviatnyi, E.D. Gilles, A. Anoprienko, and T. Osipova., Modelling and simulation of a chemical reactor for the production of acetic acid II. two-phase model. In *Informatics, Cybernetics and Computer Science (ICCS-98)*, pages 15-23. Donetsk State Technical University, Donetsk, 1998.
4. Agreda V.H., Zoeller J.R., *Acetic Acid and its Derivatives*. Marcel Dekker Inc., N.Y., 1993, 451p.
5. Kienle A., Pfisterer F., Waschler R., Sviatnyj S., Gilles E.D., Anoprienko A., Osipova T. Modeling and simulation of a chemical reactor for the production of acetic acid - II. Two-phase model // *Научные труды Донецкого государственного технического университета. Серия "Информатика, кибернетика и вычислительная техника" (ИКВТ-99)*. - Донецк: ДонГТУ. - 1999. - С. 15-23.
6. Waschler R., Kienle A., Sviatnyi S., Gilles E.D., Anoprienko A., Osipova T. Modeling and Simulation of a Chemical Reactor for the Production of Acetic Acid - III. Dynamic Phase Transitions // *Problems of Simulation and Computer Aided Design of Dynamic Systems. Collected Volume of Scientific Papers*. Donetsk State Technical University. Donetsk, 1999. - P. 102-109.
7. Waschler R., Kienle A., Anoprienko A., and Osipova T. Dynamic plantwide modelling, flowsheet simulation and nonlinear analysis of an industrial production plant // In J. Grievink and J. van Schijndel, editors, *European Symposium on Computer Aided Process Engineering - 12 - ESCAPE-12*, 26–29 May, 2002, The Hague, The Netherlands, Amsterdam: Elsevier, 2002, pages 583–588.