

МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕАКТОРА СИНТЕЗА УКСУСНОЙ КИСЛОТЫ НА БАЗЕ МОДЕЛИРУЮЩЕЙ СРЕДЫ DIVA

Аноприенко А. Я., Кинле А., Святный С. Н., Осипова Т. Ф

Государственное предприятие “Азот” (г. Северодонецк, Украина),

Институт системной динамики и управляющей техники

Штуттгартского университета (ФРГ),

Кафедра ЭВМ ДонГТУ

anoprien@dstu.donetsk.ua

Abstract

Anoprienko A., Kienle A., Svyatnyi S., Osipova T. Modelling of Acetic Acid Reactor for Simulation on the Base of DIVA Environment. The detailed modelling of low-pressure methanol carbonylation technology for simulation of the reactor for acetic acid production is described. The dynamic model of the process is represented mainly by ordinary differential systems of equations (ODE) in the form suitable for efficient use of the integrated simulation environment DIVA.

1. Введение

Уксусная кислота (УК) принадлежит к числу древнейших и важнейших из используемых человеком кислот. Уксус (4-12 % водный раствор уксусной кислоты), получаемый ферментацией вина, известен человечеству уже по меньшей мере 10 тысяч лет. В настоящее время мировые мощности по производству уксусной кислоты рассчитаны на производство более 5-ти миллионов тонн продукта в год, при этом реально производится около 4-х миллионов тонн [1]. Весьма показателен процесс постепенного усложнения технологии производства УК от простейших “кустарных” методов до высокоавтоматизированных, требующих развитой модельной поддержки.

Первым известным процессом получения уксусной кислоты был так называемый „медленный процесс“ или „французский метод“, который заключается в многодневном брожении вина в деревянных емкостях. В начале 19-го века был разработан так называемый „быстрый процесс“ или „немецкий метод“, в котором за счет интенсивного продувания воздухом период получения кислоты удалось сократить до 5-ти дней. Более ста лет данный процесс являлся основным, до тех пор, пока в начале 20-го века не началось производство уксусной кислоты из метанола. Впервые процесс получения уксусной кислоты из метанола и окиси углерода при высоком давлении и высокой температуре был описан фирмой BASF в начале 1913 года. Однако экстремальные требования по температуре и давлению, а также необходимость присутствия йодида - агрессивной коррозионной субстанции - препятствовали промышленной реализации разработанного процесса. Лишь к 1941 году была разработана приемлемая для реализации технология, ориентированная на использование в качестве катализатора йодида кобальта при температуре 250°C и давлении до 700 атмосфер. Коммерческое использование данной технологии началось в 1960 году с постройки фирмой BASF в г. Людвигсхафене химического предприятия, ориентированного на ежегодное производство 3600 тонн уксусной кислоты. В последующем десятилетии объем данного производства был увеличен более чем на порядок, а в 1966 году аналогичное предприятие было построено в США.

В настоящее время основным методом промышленного производства уксусной кислоты является процесс карбонизации метанола с родиевым катализатором, открытый в

исследовательских лабораториях фирмы Monsanto (США) в середине 60-х годов и опубликованный в 1968 году [2]. Основные преимущества нового процесса заключались в резком снижении по сравнению с известным ранее процессом требуемого давления (не более 30 атм) и температуры (160° - 190°). Уже в 1970 году разработанная технология была реализована фирмой Monsanto путем постройки в Техасе (США) предприятия, ориентированного на производство 135 тысяч тонн уксусной кислоты в год. Вскоре данный процесс был признан наиболее перспективным, и если в 1972 году удельный вес данной технологии в общем производстве уксусной кислоты не превышал 10 %, то через 10 лет его доля увеличилась до 40 %, а еще через 10 лет, в начале 90-х годов, - превысила 50 %. В 70-х годах по лицензии американской фирмы Lummus Company аналогичное производство было создано и в Советском Союзе на объединении „Азот“ в г. Северодонецке. Данное производство является в настоящее время одним из основных поставщиков уксусной кислоты на Украине и странах СНГ.

Производство уксусной кислоты на северодонецком объединении „Азот“ характеризуется относительно высокой степенью автоматизации при полном отсутствии, однако, какой-либо модельной поддержки, что в современных условиях считается существенным недостатком. Именно наличие достаточно достоверных и полных моделей технологических процессов сложных химических производств позволяет с максимальной эффективностью как производить необходимую периодическую модернизацию имеющихся средств автоматизации, так и поддерживать на заданном уровне качество выпускаемой продукции и рентабельность производства в условия возрастающего износа оборудования и действия других возмущающих факторов. В связи с этим возникает задача разработки соответствующего модельного обеспечения.

2. Краткое описание технологической схемы

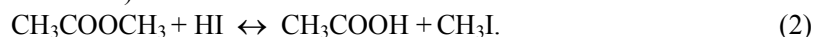
Уксусная кислота получается из метанола и окиси углерода в газожидкостном реакторе с механическим перемешиванием в присутствии катализатора и активатора в гомогенной жидкой фазе при температуре 185° С и давлении 28 атм. Реакционная смесь содержит в своем составе уксусную кислоту CH_3COOH (не менее 65 % веса), воду H_2O (от 14 до 20 % веса), йодистый метил CH_3I (до 13 % веса), йодистый водород HI (не менее 2,5 % веса), метилацетат $\text{CH}_3\text{COO CH}_3$ (до 1,5 % веса) и родий Rh (250-450 ppm). Катализатором процесса является карбонил родия в виде растворенного комплексного соединения $[\text{Rh}^+(\text{CO})_2\text{I}_2]^{-1}$. Карбонильный комплекс родия является нестойким соединением. Одним из главных условий сохранения комплекса является парциальное давление окиси углерода в растворе, величина которого должна быть 8,5-13 атм, что определяет общее давление газов в реакторе в пределах 27-29 атм. Активатором (промотором) катализатора служат йодистый метил и йодистый водород.

Механизм получения уксусной кислоты состоит в реализации четырех промежуточных реакций:

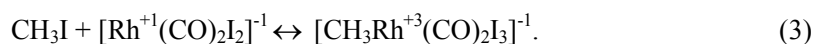
Поступающий в реакционную смесь метанол вступает в реакцию с уксусной кислотой с образованием метилацетата и воды (реакция протекает практически мгновенно при перемешивании):



Метилацетат вступает в реакцию с йодистым водородом с образованием йодистого метила и уксусной кислоты, которая вновь поступает на предыдущую реакцию (данная реакция протекает медленнее предыдущей, что объясняется незначительным количеством метилацетата в реакционной массе):



Йодистый метил окисляет родий в карбонильном комплексе до трехвалентного (реакция является самой медленной и определяет скорость реакции карбонилирования метанола в целом):



Вновь образованный комплекс вступает в реакцию с поступающей в реактор окисью углерода и получаемой по реакции (1) водой:



Полученный в последней реакции йодистый водород вступает в реакцию (2), а карбонильный комплекс родия - в реакцию (3).

Теоретическая скорость реакции карбонилирования (в г-молях метанола на литр раствора в час) определяется по уравнению:

$$F = 1795 \cdot e^n [\text{I}]^{1.05} \cdot [\text{Rh}]^{0.99}, \quad (5)$$

где $n = -7830 \cdot (1/T - 1/443)$,

T - абсолютная температура в °К,

[I]- концентрация йода (протора) в молях/литр;

[Rh] - концентрация родия (катализатора) в молях/литр.

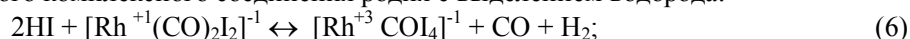
Из уравнения видно, что повышению теоретической скорости способствует:

- повышение температуры в реакторе;
- увеличение концентрации йода;
- увеличение концентрации родия.

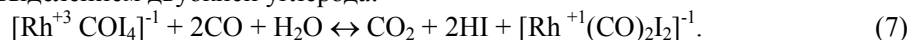
Уравнение основано на условии, что СО полностью растворяется в реакционной смеси, так как реакции синтеза протекают в жидкой фазе. Скорость расхода СО на реакцию обеспечивается достаточным перемешиванием реакционной массы и парциальным давлением СО. Полнота процесса синтеза обеспечивается тщательным перемешиванием всех потоков, поступающих в реактор. 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 карбонилирования ограничена скоростью подачи метанола и равна ей. Процентное отношение фактической скорости к теоретической вычисляется при этом как отношение фактической нагрузки по метанолу к теоретической, выраженное в процентах.

Наряду с основной реакцией образования уксусной кислоты протекает реакция конверсии окиси углерода, на которую расходуется (1,5-1,7) % СО. Протеканию этой реакции способствует избыток йодистого водорода в реакционной смеси. Механизм реакции конверсии окиси углерода описывается следующими уравнениями:

образование нового комплексного соединения родия с выделением водорода:



конверсия СО с выделением двуокиси углерода:

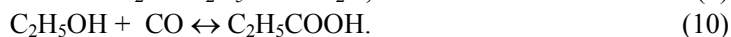
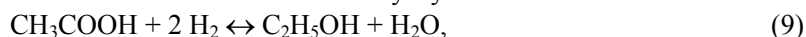


Суммарное уравнение этих двух реакций имеет вид:



В приведенных реакциях, как и в реакциях карбонилирования, родий в карбонильном комплексе меняет свою валентность от +1 до +3 и от +3 до +1, то есть протекает окислительно-восстановительный цикл.

Следствием конверсии СО является увеличение содержания инертных газов в системе синтеза (H_2 и CO_2) и снижение парциального давления СО в системе синтеза, что может нарушить стабильность катализаторного комплекса и процесса синтеза. В целом процесс карбонилирования метанола характеризуется высокой селективностью. Основным побочным продуктом является пропионовая кислота, которая образуется в результате карбонилирования этанола в количестве около 1 кг на 1 т уксусной кислоты:



Водород для реакции (9) гидрирования получается по реакции конверсии (6).

Кроме пропионовой кислоты в процессе синтеза могут образовываться другие легкокипящие примеси, такие, как муравьиная кислота, диметиловый эфир и др. Однако количество этих примесей крайне незначительно.

Процесс синтеза проводится в реакторе емкостью 59 м³ с мешалкой и барботером.

Оптимальный режим работы реактора следующий:

рабочая температура	- 185 °С
рабочее давление	- 28,1 атм.
концентрация родия	- 300 ppm
концентрация йода	- 1,1 моль/л
содержание воды	- 16 % веса
конверсия СО	- 86 % веса
конверсия СН ₃ ОН	- около 100 %
% теоретической скорости	- 65,5

Основными параметрами, по которым ведется управление процессом синтеза, является поддержание в заданных пределах скорости и температуры реакции, давления в реакторе, а также концентрации воды в реакционной смеси. Учитывая, что содержание родия и йода в системе синтеза изменяется в незначительных пределах, основной задачей управления является поддержание в заданных пределах нагрузки по метанолу. Управление этим процессом ведет УВМ.

3. Постановка задачи моделирования

Производство уксусной кислоты отличается относительно высокой сложностью и многообразием влияющих на ход процесса параметров, сложной кинетикой химических реакций, распределенностью параметров и нелинейностью характеристик элементов технологической схемы как объектов моделирования. Существующее производство, функционирующее по технологии США, в высокой степени автоматизировано. Однако, управление процессом ведется по технологическим схемам, которые не учитывают изменения параметров реактора с течением времени. В связи с этим встает вопрос оптимизации технологического процесса и создания соответствующей математической модели реактора синтеза и системы автоматизированного управления. Такая модель необходима для поиска оптимального режима работы реактора и системы управления, обучения и тренировки обслуживающего персонала, а также повышения безопасности работы реактора.

Наличие большого количества сложных химико-технологических устройств и процессов существенно затрудняет моделирование всего комплекса в целом. Поэтому формирование модели производства логично начать с одного, важнейшего элемента. Таким элементом является газожидкостный реактор ДС-1101 с механическим перемешиванием, в котором и происходят основные реакции синтеза УК. Химические процессы, происходящие в реакторе, также характеризуются большой степенью сложности, и существенно нетривиальной является задача построения даже качественно упрощенной математической модели всех основных реакций с учетом их динамики.

Создание модели сложного физико-химического процесса является, как правило, итерационным процессом, когда функционирование разрабатываемой компьютерной модели постоянно сравнивается с параметрами реального процесса и соответственно корректируется.

При этом необходим синтез знаний из различных научных областей, в частности, необходимо учитывать:

- физические законы сохранения вещества, энергии и импульса;
- термодинамические свойства веществ;
- химические механизмы и кинетика реакций.

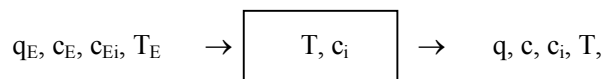
Как известно из термодинамики, термодинамические параметры состояний можно разделить на экстенсивные (например, объем, масса, количество вещества и т. д.) и интенсивные (температура, давление и др.). Одним из ключевых моментов формирования модели является составление уравнений баланса для экстенсивных переменных состояния и преобразование уравнений балансов в дифференциальные уравнения для интенсивных переменных состояния.

4. Составление уравнений баланса вещества

В общем случае составление модели реактора химического синтеза целесообразно начинать с составления уравнений баланса вещества и энергии. При этом для упрощения модели могут быть приняты следующие допущения:

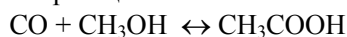
- содержимое реактора перемешивается идеально;
- тепло, образующееся в результате трения при перемешивании жидкости пренебрежимо мало;
- теплоемкость стенок и других составных частей реактора пренебрежимо мала;
- реактор является однофазовым, т.е. реакционная смесь находится только в жидкой фазе, а весь газ, поступающий в реактор мгновенно перемешивается с жидкостью.

Схематично реактор может быть представлен следующим образом:



где q_E и q соответствуют втекающему в реактор и вытекающему из него объемному потоку, выраженному в единицах объема ($\text{м}^3/\text{с}$), c_{Ei} и c_i - соответствуют молярной объемной концентрации i -й компоненты втекающего и вытекающего потоков, T_E и T - температура соответственно втекающего и вытекающего потоков.

В реакторе происходит химическая реакция



со скоростью r_0 , описываемой эмпирическим соотношением

$$r_0 = 1795 \cdot e^{-7830 \cdot (1/T - 1/443)} \cdot c_i^{1,05} \cdot c_{Rh}^{0,99} \quad (11)$$

где

T - абсолютная температура в реакторе [K];

c_i - концентрация иода (активатора-промотора) [моль/л];

c_{Rh} - концентрация родия (катализатора) [моль/л].

Рассмотрим уравнение баланса в обобщенной форме, полагая, что реакция имеет вид:



и протекает со скоростью r_0 . Через v при этом обозначен стехиометрический коэффициент для соответствующих веществ.

Уравнение баланса (сохранения) компонент для вещества А может быть представлено в виде:

$$\frac{dn_A}{dt} = q_E \cdot c_{AE} - q \cdot c_A + v_A \cdot r_0 \cdot V, \quad (12)$$

где

r_0 - эквивалентная скорость реакции [моль/ $\text{м}^3\text{с}$];

V - объем реактора.

Для веществ В и С можно записать аналогичные уравнения. В итоге обобщенное уравнение баланса компонент может быть представлено в следующем виде:

$$\frac{dn_i}{dt} = q_E \cdot c_{Ei} - q \cdot c_i + v_i \cdot r_0 \cdot V. \quad (13)$$

При этом n_i может быть выражено через объем и молярную объемную концентрацию соответствующей компоненты:

$$n_i = c_i \cdot V. \quad (14)$$

Откуда следует, что

$$\frac{dn_i}{dt} = c_i \frac{dV}{dt} + V \frac{dc_i}{dt}. \quad (15)$$

Подставляя уравнение (15) в (13), получаем

$$V \frac{dc_i}{dt} = q_E \cdot c_{Ei} - q \cdot c_i + v_i \cdot r_0 \cdot V - c_i \frac{dV}{dt}. \quad (16)$$

Если предположить, что объем реагирующего вещества в реакторе не зависит от времени, то уравнение (16) упростится следующим образом:

$$V \frac{dc_i}{dt} = q_E \cdot c_{Ei} - q \cdot c_i + v_i \cdot r_0 \cdot V. \quad (17)$$

Уравнение может быть еще более простым, если предположить также равенство втекающего и вытекающего потоков:

$$\frac{dc_i}{dt} = \frac{q}{V} (c_{Ei} - c_i) + v_i \cdot r_0. \quad (18)$$

В данном конкретном случае для трех участвующих в реакции веществ уравнения сохранения вещества примут следующий вид (коэффициент v_i при этом принимает единичное значение):

$$\frac{dc_{CO}}{dt} = \frac{q}{V} (c_{Eco} - c_{CO}) + (-r_0); \quad (19)$$

$$\frac{dc_{Met}}{dt} = \frac{q}{V} (c_{Emet} - c_{met}) + (-r_0); \quad (20)$$

$$\frac{dc_{aa}}{dt} = \frac{q}{V} (c_{Eaa} - c_{aa}) + r_0. \quad (21)$$

В уравнение (21) константа скорости реакции r_0 входит со знаком (+), т.к. уксусная кислота образуется в процессе реакции, а в уравнения (19) и (20) со знаком (-), так как СО и метанол в данном случае расходуются. Кроме того, $c_{Eaa} = 0$, т. к. кислота в реактор не поступает.

В связи с тем, что реакция является каталитической, необходимо учесть также изменения концентрации иода и родия:

$$\frac{dc_I}{dt} = \frac{q}{V} (c_{EI} - c_I); \quad (22)$$

$$\frac{dc_{Rh}}{dt} = \frac{q}{V} (c_{ERh} - c_{Rh}). \quad (23)$$

В уравнения (22) и (23) не входит r_0 , так как родий и иод непосредственно в протореакции не участвуют. Кроме этого концентрацию иода и родия в реакторе можно считать практически постоянной. Тогда приведенные выше уравнения сведутся к алгебраическим. Таким образом, мы получили пять уравнений баланса вещества, в три из которых в качестве неизвестного входит температура реакционной смеси.

5. Уравнения сохранения энергии

Для вывода недостающего уравнения, описывающего изменение температуры в реакторе, воспользуемся законом сохранения энергии.

Полагая, что в системе происходит только работа по изменению объема, исходя из первого закона термодинамики, получаем следующее уравнение :

$$\frac{dU}{dt} = J_Q - p \frac{dV}{dt} \quad (24)$$

При этом U представляет собой внутреннюю энергию системы [КДж], а J_Q - внутренний тепловой поток, возникающий за счет теплообмена с окружающей средой (например, за счет отбора тепла охлаждающей системой). При переходе к открытой системе, т.е. системе, в которую поступают, и из которой выходят потоки вещества, необходимо принять во внимание энергию, переносимую этими потоками. Кроме того, необходимо принять во внимание работу, необходимую для того, чтобы поток попал в реактор, связанную с преодолением избыточного давления.

Влияние обоих факторов можно объединить во входные и выходные потоки энтальпии и соответственно переписать уравнение (24):

$$\frac{dU}{dt} = q_E c_E h_E^* - q c h^* + J_Q - p \frac{dV}{dt} \quad (25)$$

Принимая во внимание определение энтальпии (тепловая функция или теплосодержание $H = U + pV$) можно подставить в уравнение (23) соответствующее выражение для U и получить:

$$\frac{dH}{dt} - p \frac{dV}{dt} - V \frac{dp}{dt} = q_E c_E h_E^* - q c h^* + J_Q - p \frac{dV}{dt}; \quad (26)$$

$$\frac{dH}{dt} = q_E c_E h_E^* - q c h^* + J_Q + V \frac{dp}{dt} \quad (27)$$

При подстановке полного дифференциала энтальпии и соотношений Максвелла после соответствующих упрощений для температуры в итоге может быть получена следующая формула:

$$\frac{dT}{dt} = J_Q + \frac{q_E}{V} (T_E - T) - r_0 \frac{\Delta h_r}{c \cdot C_p}, \quad (28)$$

где Δh_r - молярная энтальпии реакции,

C_p - значение теплоемкости при постоянном давлении.

При этом предполагается, что в реакторе синтеза обеспечивается идеальное перемешивание. Во многих случаях теплообмен с окружающей средой J_Q также может не учитываться.

Итак, в первом приближении, получена математическая модель реактора синтеза уксусной кислоты, состоящую из шести дифференциальных уравнений с заданными начальными условиями. Для проведения модельных экспериментов воспользуемся возможностями среды моделирования химико-технологических процессов DIVA, разработанной в Штуттгартском университете (Германия).

6. Моделирующая среда DIVA

Прототип моделирующей среды DIVA был разработан в 1987-90 гг. в институте системной динамики и управляющей техники Штуттгартского университета на базе проводившихся ранее в институте исследовательских работ в области разработки моделирующих систем технологической ориентации и моделирования отдельных технологических процессов и аппаратов [3, 4]. Одним из первых применений среды стала реализация в 1989 году тренировочной системы моделирования химических процессов для учебного центра фирмы BASF, занимающей третье место в мире по объемам химического производства.

В настоящее время в качестве основных областей применения средств моделирования DIVA рассматриваются следующие:

- Разработка и оптимизация аппаратов химических и биологических производств, в т. ч. выбор конкретных вариантов построения аппаратов и их размеров и выбор конкретных

технологических процессов исходя из их энерго- и материалоемкости, а также нагрузки на окружающую среду.

- Наблюдение за технологическими процессами и управление ими, в т.ч. модельное отслеживание тех параметров процессов, которые не могут быть измерены непосредственно, определение причин отклонения текущих параметров процессов от заданных, обеспечение оптимальных условий реализации технологических процессов по критериям безопасности и производительности.
- Обучение и тренаж, в т. ч. использование в учебном процессе при подготовке специалистов соответствующих профилей, а также подготовка, текущий контроль и тренаж производственного персонала.

Основные концепции построения среды DIVA заключаются в следующем:

Во-первых, математическая модель процесса, пригодная для реализации в среде DIVA, может быть представлена системами алгебраических и обыкновенных дифференциальных уравнений, а также системами уравнений в частных производных с заданными начальными и граничными условиями.

Во-вторых, моделирование рассматривается как блочно-ориентированное (может быть также интерпретировано как объектно-ориентированное), что предполагает задание модели в виде совокупности относительно автономных блоков - базовых элементов, каждый из которых может быть или стандартным элементом из библиотеки, или некоторым специфическим элементом, заданным пользователем. Каждый из блоков может иметь свою, иногда довольно сложную, математическую модель. В среде DIVA каждому блоку соответствует Фортран-программа, процесс создания которой автоматизирован и выполняется специальной программой-кодогенератором.

В качестве примеров могут быть приведены следующие базовые элементы:

- Технологические, в т. ч. химические и биологические реакторы, дистилляционные колонны, конденсаторы, испарители, теплообменники, насосы, мешалки, вентили, накопители;
- Управляющие, в т. ч. регуляторы, датчики и пр.;
- Специальные, в т.ч. элементы “вход” и “выход”, умножители, делители, переключатели, преобразователи.

7. Результаты моделирования

Для моделирования работы реактора синтеза уксусной кислоты, модель, записанная в виде системы обыкновенных дифференциальных уравнений, должна быть трансформирована в базовый элемент моделирующей среды DIVA. Данное преобразование выполняет разработанная в Штуттгартском университете программа автоматической генерации кода (Code-Generator). Генератор кода позволяет создавать базовые элементы реальных химико-технологических блоков, описываемых системами обыкновенных дифференциальных уравнений, системами алгебро-дифференциальных уравнений и системами уравнений в частных производных с соответствующими начальными и граничными условиями.

Для проведения модельных экспериментов задаются все необходимые параметры реактора, химические константы участвующих в процессе синтеза веществ и начальные условия процесса. Для моделирования были приняты следующие значения физических и химических параметров, входящих в уравнения:

Название параметра	Обозначение	Величина параметра
Объем реактора	V	59.0 м ³
Входной объемный поток	q	4.96 · 10 ⁻³ м ³ /с
Входная концентрация УК	c _{Eaa}	0.0 моль/м ³
Входная концентрация СО	c _{ECO}	17.5 · 10 ³ моль/м ³
Входная концентрация метанола	c _{Emeth}	17.5 · 10 ³ моль/м ³

Концентрация иода	c_{E1}	1.1 моль/м ³
Концентрация родия	c_{Eh}	$3.0 \cdot 10^{-4}$ моль/м ³
Энтальпия реакции синтеза	Δh_R	- 123.3 кДж/моль
Плотность реакционной смеси	ρ	$9.875 \cdot 10^2$ кг/м ³
Теплоемкость реакционной смеси	C_p	2.23 кДж/м ³

После задания всех необходимых параметров, генерации базовых элементов и подготовки исполняемого модуля DIVA, описывающего реактор синтеза уксусной кислоты, можно переходить непосредственно к экспериментам над моделью. Результаты моделирования сохраняются в файлах и могут быть представлены в виде многомерных графиков с помощью специальных средств визуализации, разработанных на базе системы MATLAB, предназначенной для матрично-ориентированного анализа и синтеза динамических систем. Получены, в частности, графики изменения концентраций содержащихся в реакторе синтеза веществ и температурный профиль в реакторе синтеза.

Полученная на первом этапе модель реактора синтеза уксусной кислоты описывает происходящие в реакторе процессы весьма приблизительно. Следующими этапами на пути улучшения полученной модели и ее практического применения, являются сравнение полученных результатов с реальными данными, уточнение параметров реактора и параметров модели, более детальное описание кинетики протекающих в реакторе процессов, введение в модель контуров управления. Моделирующая среда DIVA может оказать пользователю поддержку на всех этих этапах. В настоящий момент среда моделирования DIVA, программы генерации кода и визуализации полученных результатов функционируют на компьютерах класса Sun под ОС Solaris 2.1 и персональных компьютерах под управлением операционных систем OS/2 и Linux.

Заключение

В статье представлена модель реактора синтеза уксусной кислоты, разработанная в ходе выполнения первого этапа трехстороннего договора о сотрудничестве между Северодонецким ПО "Азот", кафедрой ЭВМ ДонГТУ и институтом системной динамики и управляющей техники Штуттгартского университета. Модель сформирована на базе системы дифференциальных уравнений, описывающих динамику изменения концентраций присутствующих в реакторе веществ и температуры реакционной смеси. Исследование полученной модели проводилось с помощью моделирующей среды DIVA, разработанной в Штуттгартском университете.

Для практического использования результатов моделирования необходима идентификация параметров модели, сравнение модельных результатов с данными реального производства, включение в модель контуров управления, разработка эффективного алгоритма управления процессом производства уксусной кислоты с учетом модельного обеспечения.

Литература

1. Acetic Acid and its Derivatives. Edited by Agreda V.H., Zoeller J.R. Marcel Dekker Inc., N.Y., 1993, 451 p.
 2. Paulik F. E., Roth J. F. Chem. Commun., 1968, p. 1578.
 3. Holl P., Marquardt W., Gilles E.D. DIVA - A powerful tool for dynamic process simulation. Computers in Chemical Engineering, 12, 1988, pp. 421-425.
 4. Kröner A., Holl P., Marquardt W., Gilles E. D. DIVA - an open architecture for dynamic simulation. Computers and Chemical Engineering, 14, 1990, pp. 1289-1295.
-

Как правильно ссылаться на эту статью:

Аноприенко А.Я., Кинле А., Святный С.Н., Осипова Т.Ф. Моделирование реактора синтеза уксусной кислоты на базе моделирующей среды DIVA // Сборник научных трудов ДонГТУ. Серия «Информатика, кибернетика и вычислительная техника». Выпуск 1 (ИКВТ-97). – Донецк: ДонГТУ. – 1997. С. 16-21.