

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МУЛЬТИСТАДИЙНЫХ ПРОЦЕССОВ СИНТЕЗА С ОБРАТИМЫМИ РЕАКЦИЯМИ НА ПРИМЕРЕ СИНТЕЗА РАСТВОРА ДХП

В.В. Авхадеев (ЗАО "Каустик")

В работе рассмотрен системный подход к математическому моделированию сложных, многостадийных химико-технологических процессов, позволяющий учитывать как стехиометрические зависимости протекающих реакций, так и их кинетические константы. Системный подход к моделированию подобного рода объектов рассматривается на примере технологического процесса синтеза раствора дихлорпропанолов (ДХП). Результаты исследования и разработанный системный подход применимы для широкого ряда химико-технологических процессов синтеза и ректификации в химических производствах аналогичного профиля.

Одной из наиболее характерных черт современных химических производств является стремление к совершенствованию технологий, повышению производительности оборудования и увеличению единичной мощности агрегатов. При этом развитие современного производства сопровождается непрерывным возрастанием требований к качеству функционирования технических систем, которые необходимо учитывать на этапе разработки систем управления технологическими процессами. Организация управления современным производством требует пересмотра традиционных схем управления и нового системотехнического подхода к разработке схем контроля и автоматизации. В этом случае проектируются не отдельные узлы автоматизации, а единая техническая система, которая включает в себя все устройства контроля и учитывает взаимосвязь и влияние этих устройств друг на друга.

Разработка модели концептуального уровня ТП синтеза раствора ДХП

Процесс получения ДХП можно охарактеризовать как многостадийный ТП с большим числом обратимых реакций. Входными переменными являются потоки каустика, хлора, хлористого аллила и воды, выходными – потоки ДХП (целевой продукт) и ТХП (побочный хлороорганический продукт) [1].

Каждый из технологических потоков характеризуется набором информационных переменных, которые на данном этапе моделирования предлагается разделить на четыре класса:

- параметры, оперативное измерение которых представляется возможным;
- параметры, измерить которые оперативно не представляется возможным в силу ряда причин (высокая коррозионная активность, неустойчивость химических соединений и т.д.);
- параметры, которые вводятся оператором (данные лабораторных анализов или коэффициенты для настройки, обучения модели в РВ);
- расчетные параметры, оперативное измерение которых представляется возможным.

Развернутая модель концептуального уровня ТП синтеза раствора ДХП [2] представлена на рис. 1.

С целью идентификации математической модели ТП синтеза водного раствора ДХП предлагается про-

анализировать каждый информационный параметр по заранее заданным критериям оценки [3]. На основе анализа представляется возможным разработать информационную модель, которая будет адекватна реальному ТП с заданной точностью.

Выделим следующие критерии идентификации параметров:

- возможность измерения (позволит классифицировать параметры на измеряемые и виртуальные);
- оперативность измерения (позволит классифицировать параметры по возможности его измерений в режиме РВ);
- достаточность точности измерения для целей управления (позволит детерминировать границы точности для каждого параметра);
- информативность и однозначность (определяют насколько точно и однозначно текущее значение

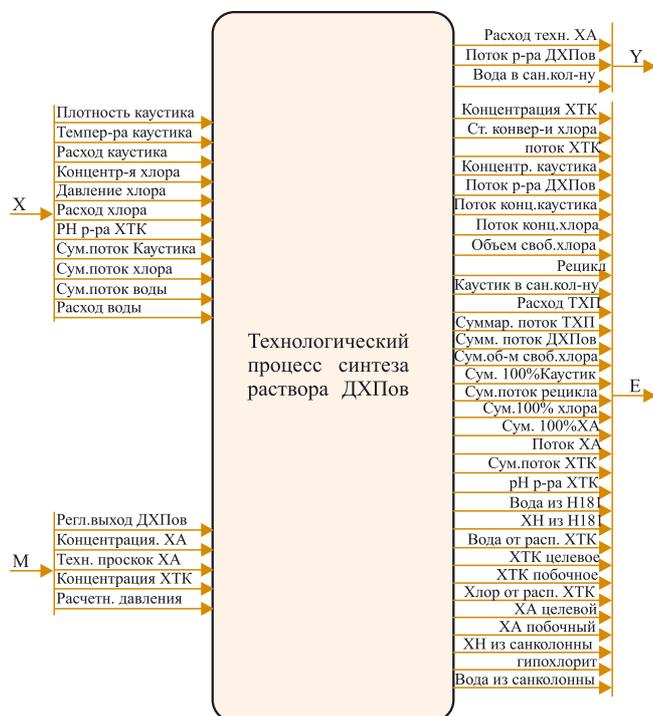


Рис. 1. Развернутая модель ТП синтеза водного раствора ДХП концептуального уровня, где:

X/Y – входные/выходные оперативно измеряемые переменные;
M – входные переменные, вводимые вручную; E – выходные расчетные переменные (показатели качества продукции и экономической эффективности работы реакторов синтеза ДХП)

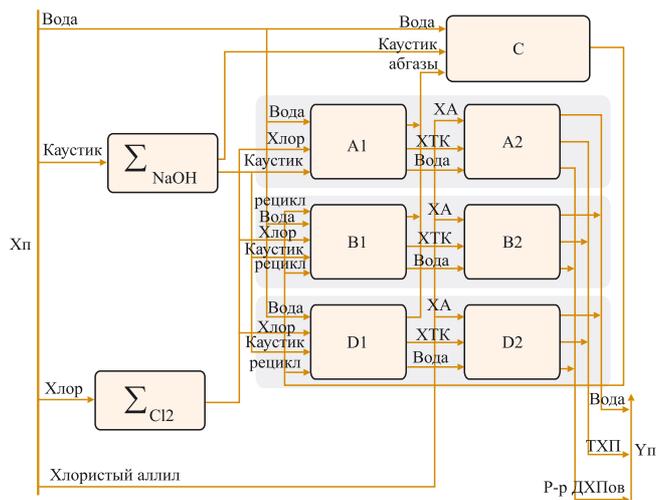


Рис. 2. Структура технологических потоков процесса синтеза раствора ДХП в производственных условиях

данного параметра определяет состояние технологического объекта оперативного управления).

Данный подход позволит классифицировать все информационные параметры и повысить объективность их оценки.

Отличие различных режимов протекания процесса синтеза раствора ДХП

При разработке модели процесса синтеза раствора ДХП будут использоваться закономерности протекания данного процесса как в лабораторных, так и производственных условиях. В лабораторной практике используются входные активные компоненты в концентрированном виде [1]. В результате чего селективность и показатель степени селективности хлора для данного процесса (в лабораторных условиях) выше. Кроме того, в лабораторной практике отсутствует "проскок" хлора и хлористого аллила (ХА). Иными словами, лабораторный режим представляется как объект изучения, в котором отсутствуют некоторые факторы, присущие производственным условиям, что облегчает его изучение. Очевидно, что модель процесса, протекающего в лабораторных условиях, не будет в деталях соответствовать реальным производственным условиям [4].

Синтез раствора ДХП в производственных условиях сопровождается постоянным изменением концентраций входных активных компонентов, технологическим проскоком ХА и выбросами абгазного хлора из реакторов синтеза хлорноватистой кислоты (ХТК), что обуславливает присутствие дополнительного реактора – санитарной колонны.

Разработка модели топологического уровня ТП синтеза раствора ДХП

Структура этапов (стадий) и технологических потоков данного процесса представлена на рис. 2. Входные активные компоненты из буферного емкостного парка поступают в три параллельные технологические нитки А, В и D. На начальном этапе (рис. 2) конечным целевым продуктом является синтезируемая

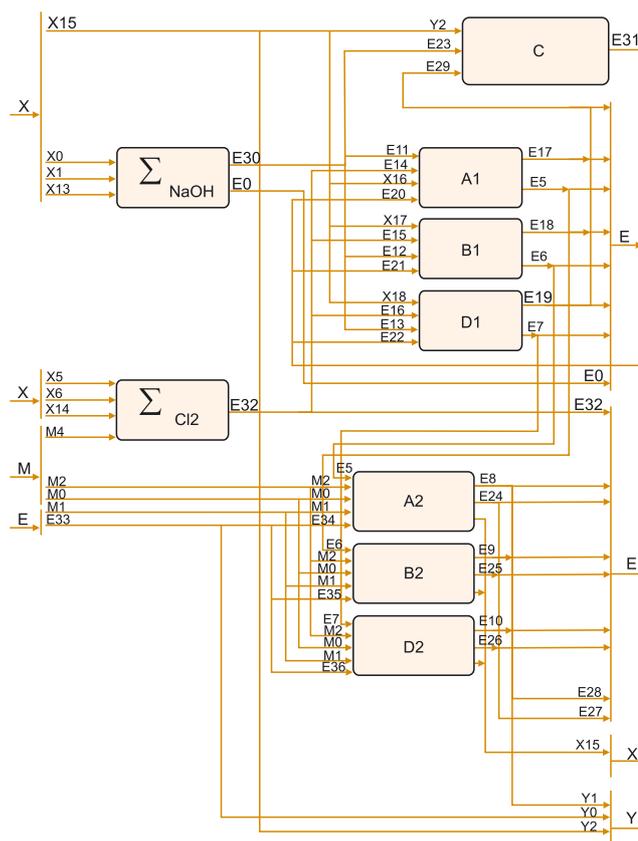


Рис. 3. Модель топологического уровня А01 технологического процесса синтеза раствора ДХП

ХТК, поступающая в реакторы синтеза раствора ДХП. Не прореагировавшие активные хлорсодержащие компоненты поступают в санитарную колонну. После частичной нейтрализации они рециклом возвращаются в реакторы синтеза ХТК. Физическим результатом синтеза является получение ХТК на выходе реакторов [1].

Помимо синтезируемого раствора ДХП, на выходах технологических ниток присутствуют ТХП. Их образование в реакционной смеси неизбежно, вследствие высокой степени обратимости большинства протекающих реакций.

Показателем стабильной работы какой-либо технологической нитки в рамках технологического регламента является факт подачи в нее ХА и хлора. В случае прекращения подачи в реакторы одного из этих компонентов технологическая нитка считается остановленной.

Используя полученную структуру технологических потоков процесса (рис. 2) и модель концептуального уровня, возможно разработать модель топологического уровня ТП синтеза раствора ДХП (рис. 3) [2] с использованием ранее введенной градации сигналов по четырем подмножествам, согласно их информационной принадлежности.

В блоке, моделирующем работу входного буферного парка для каустика (рис. 3), выполняется коррекция по плотности и температуре (X0 и X1), после чего вычисляется суммарный поток каустика с уче-

том дискретных коэффициентов, являющихся признаками работы каждой из технологических ниток отдельно. Значение расхода разбавленного каустика является аргументом (подмножество X), а величина массового расхода концентрированного каустика – функцией (подмножество E).

В блоке, моделирующем работу входного буферного парка для хлора, выполняется коррекция по концентрации и избыточному давлению в буферной емкости (X5 и X6), после чего вычисляется суммарный поток хлора с учетом дискретных коэффициентов, являющихся признаками работы каждой из технологических ниток отдельно. Значение расхода абгазного хлора является аргументом, а величина массового расхода концентрированного хлора – функцией.

На входы информационных блоков, имитирующих работу реакторов синтеза ХТК для каждой технологической нитки А, В и D, поступают вычисленные значения массовых расходов каустика и хлора и значения входных потоков воды (подмножество X). Каждый из информационных блоков моделирует значения основных переменных стадии синтеза ХТК для каждой технологической нитки автономно, использует в своих вычислениях влияние санитарной колонны. Для каждого реактора автономно вычисляется величина не прореагировавшего хлора (параметры E17 – E19), которая является функцией в вычислениях данного информационного блока и аргументом в работе блока, имитирующего алгоритмы воздействия санитарной колонны. Исходя из этих соображений, суммарная величина возвратного рецикла из санитарной колонны E31 является функцией в работе информационного модуля, описывающего алгоритм работы санитарной колонны, и является аргументом в модулях, описывающих алгоритм работы реакторов синтеза ХТК каждой технологической нитки автономно. Данный подход в разработке структуры математической модели топологического уровня позволяет учитывать возмущающее воздействие в среде активных компонентов в реакторах синтеза ХТК, оказываемое функционированием санитарной колонны.

Производимые вычисления актуальны только для 100% концентраций активных реагентов, а без блока входной коррекции неадекватно отражают действительность. Информационные блоки, воспроизводящие алгоритмы работы реакторов синтеза ХТК позволяют производить вычисления:

- количества производимой хлорноватистой кислоты (аргументы – значения массовых расходов каустика, хлора (подается в избытке) и воды);
- значений входных потоков каустика и хлора при заданном параметре производительности (аргумент – количество синтезируемой хлорноватистой кислоты).

Вычисленные значения поступают в интегрированный информационный модуль, моделирующий алгоритм работы реакторов синтеза раствора ДХП и включающий три информационных блока, каждый из которых моделирует основные взаимосвязи и значе-

ния внутренних переменных и на этапе синтеза ДХП отдельно по каждой технологической нитке – А, В и D. Помимо вычисленных значений потоков синтезированной ХТК (E5 – E7) в информационные блоки поступают данные о входных потоках ХА (E33 – E36) и различные коэффициенты градуировки данного информационного блока (подмножество M), которые позволяют перенастроить математическую модель под различные типы реакторов аналогичного профиля. Под этими коэффициентами подразумеваются:

- производственный выход синтезируемого раствора ДХП в соответствии с технологическим регламентом (M0);
- концентрация ХА, подаваемого в реакторы синтеза раствора ДХП (M1);
- технический "проскок" ХА, т.е. производственные потери ХА (M2).

Практическим результатом работы информационных блоков, моделирующих работу реакторов синтеза раствора ДХП, является вычисление значений количества синтезируемого раствора ДХП (параметры E8 – E9, E28), количества синтезируемого ТХП (E24 – E27) и конкретизация входного потока ХА (E34 – E36).

Информационный блок, моделирующий алгоритмы работы санитарной колонны, отражает основные закономерности, протекающие в этом реакторе, и конкретизирует значения величин прямых и обратных потоков хлорных реагентов (внутренние переменные), которые циркулируют между реакторами синтеза ХТК и санитарной колонной, служат для нейтрализации оставшейся доли активного, не прореагировавшего хлора в реакторах синтеза ХТК. Возвращаясь обратно в реактор, они снижают долю экологических выбросов, повышая производительность ТП, но оказывают сильное возмущающее воздействие, сдвигая область рН компонентов в сторону кислой среды. Данный блок конкретизирует количество возвратных рециклов хлорсодержащих компонентов (E20 – E22). На вход данного блока подаются значения величин потоков каустика и воды (в зависимости от выбранного режима вычислений, данные величины могут быть включены как в вектор X, так и в вектор E).

Практическим результатом работы информационного блока, моделирующего основные алгоритмы работы санитарной колонны, является вычисление значений возвратных рециклов, подаваемых в реакторы синтеза ХТК, для каждой технологической нитки автономно (вектор E). Значения этих параметров снижаются с выходов данного информационного блока.

Разработка математической модели процесса синтеза раствора ДХП (на примере одной технологической нитки)

Основной задачей на данном этапе моделирования является формирование операторов связей. Сепаратные автономные информационные операторы связей предлагается структурировать с целью поиска идентичных и аналогичных с последующим разделением на операторы аналоговые, базирующиеся на

функциональной структуре непрерывного характера, и дискретные, несущие алгоритм логического умножения переменных, с целью последующей коммутации при интегрировании моделей отдельных технологических узлов в единую общую информационную модель процесса [3].

Для формирования операторов связей предлагается структурировать модель процесса топологического уровня раздельно по каждому технологическому узлу с выделением ряда автономных алгоритмов, являющихся мельчайшими звеньями (операторами связей) в общей информационной структуре; получить модель структурного уровня каждого технологического узла отдельно, интегрируя автономные операторы в единую систему. С целью разработки общей информационной модели предлагается интегрировать модели автономных технологических узлов с учетом дискретных операторов связей.

В качестве примера рассмотрим оператор связей W1, отражающий основной алгоритм взаимодействия каустика в каждой технологической нитке без учета стехиометрических соотношений. Соответственно выделяют W1A, W1B, W1D (рис. 4).

Оператор W1A рассчитывается по формуле:

$$F_{NaOH} = F_{1452A} \times C + \frac{F_{1457} \times F_{1455A} \times C}{F_{1455A} + F_{1455B} + F_{1455D}}$$

Операторы связей W1B и W1D вычисляются аналогично.

Вторым этапом процесса синтеза ДХП является хлоридгидроксилирование ХА. Данный этап процесса наиболее сложен для математического описания, так как помимо конечного продукта ДХП в реакторе неизбежно образование и побочных хлорорганических продуктов (ТХП и ХЭ). Лабораторный анализ реакционной смеси в реакторе синтеза показывает, что массовая доля ХЭ по сравнению с ТХП ничтожно мала. Кроме того, образование ТХП ведет к повышенному потреблению ХА, что и обуславливает его производственные потери. Определенную сложность в математическое описание этапа хлоридгидроксилирования ХА вносят такие дестабилизирующие факторы, как [5]: технологический "проскок" ХА; расход ХА на синтез ТХП; ограничения по производственному выходу раствора ДХП; процесс химического распада синтезированной ХТК; подача в реактор неконцентрированного ХА.

Алгоритм вычисления необходимого количества ХА, количества синтезируемого раствора ДХП и побочного ТХП приведен на рис. 5.

На базе разработанных операторов связей, используя функциональную модель процесса (рис. 3),

становится возможным разработать математическую модель ТП синтеза раствора ДХП [2]. В связи с тем, что данный ТП включает три параллельные нитки, рационально разработать информационную модель для одной. Впоследствии, объединив три модели отдельных ниток при исключении дублирования общих узлов (стадия входной подготовки, а также санитарная колонна), становится возможным получить информационную модель всего ТП.

На рис. 6 изображена математическая модель для одной нитки ТП синтеза раствора ДХП.

Полученная информационная модель строится на базе стехиометрических соотношений, следовательно позволяет вести вычисления в различных направлениях.

В случае объявления входных переменных аргументами, результатом вычислений (функцией) будут значения производственной мощности (параметры E27, E28, а также E5 – E7).

В случае объявления выходных переменных аргументами, результатом вычислений (функцией) будут значения расходов входных активных компонентов (значения

сырьевых затрат).

Необходимо отметить, что в данной математической модели используются лишь те параметры, которые возможно непосредственно измерить. Вторая часть математической модели базируется на виртуальных параметрах, т.е. результатах информационной декомпозиции [3].

Использование данной математической модели в составе системы управления технологическим процессом синтеза раствора ДХП [4,5] позволит:

- снизить потери хлористого аллила;
- повысить производственный выход целевого продукта – раствора ДХП;
- сократить количество ТХП на единицу готовой продукции;
- повысить качество получаемого раствора ДХП за счет снижения содержания продуктов побочных окислительно-восстановительных процессов, сократить образование хлорорганических примесей в конечном продукте синтеза.

Кроме того, сокращение потерь хлористого аллила и количества побочных хлорорганических продуктов положительно сказывается на качестве сточных вод в экологическом аспекте [5].

Результаты данной научно-исследовательской работы внедрены в учебный процесс на кафедре автоматизации химико-технологических процессов УГНТУ в виде программы-имитатора, разработанной на базе математической модели ТП синтеза раствора

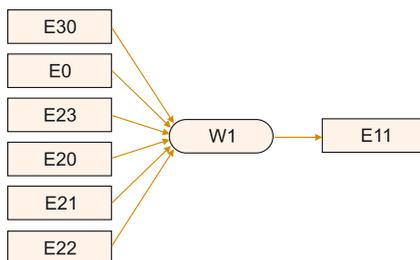


Рис. 4. Информационная структура оператора связей W1, где: E30 – поток щелочи, подаваемый в реактор синтеза ХТК с учетом возврата из санитарной колонны H-181С; E0 – концентрация каустика; E11 – поток щелочи, подаваемый в реактор синтеза ХТК; E23 – поток каустика, подаваемый в санитарную колонну; E20 – E22 – поток каустика, подаваемый в реакторы синтеза ХТК каждой технологической нитки (А, В, D) из санитарной колонны (рецикл каустика)

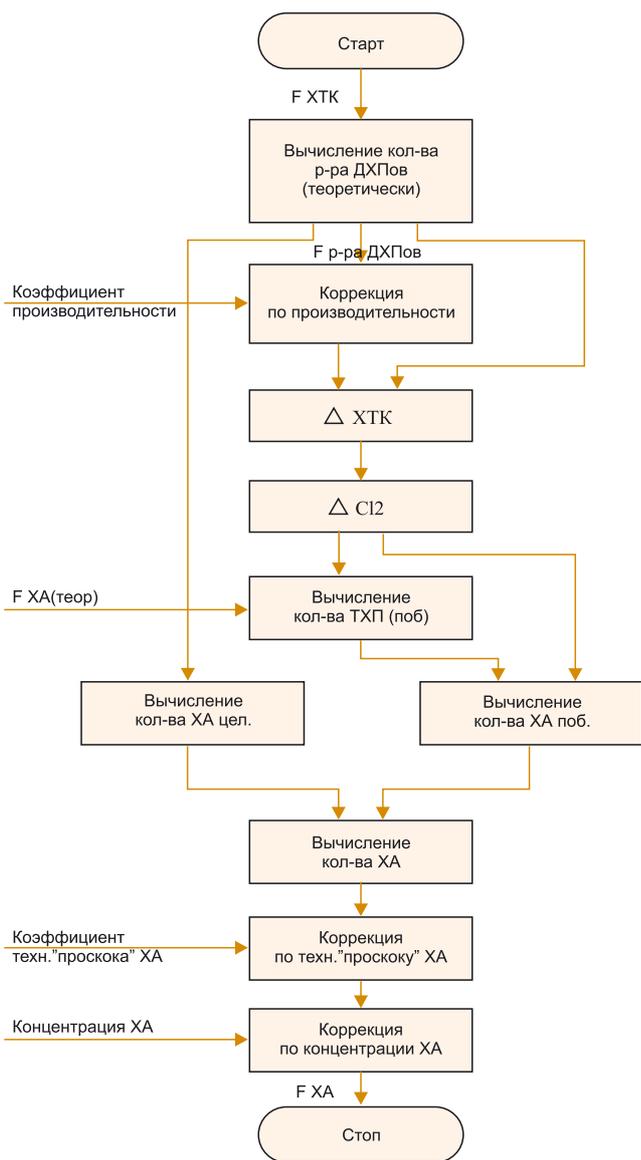


Рис. 5. Алгоритм вычисления количества синтезируемого раствора ДХП, побочного ТХП и необходимого для этого количества ХА

дихлорпропанолов и реализованная в инструментальной системе Trace Mode 5.

Кроме того, разработанная математическая модель процесса синтеза раствора дихлорпропанолов успешно прошла опытно-промышленные испытания на Стерлитамакском ЗАО "Каустик". Предлагаемый системный подход разработки математических моделей,

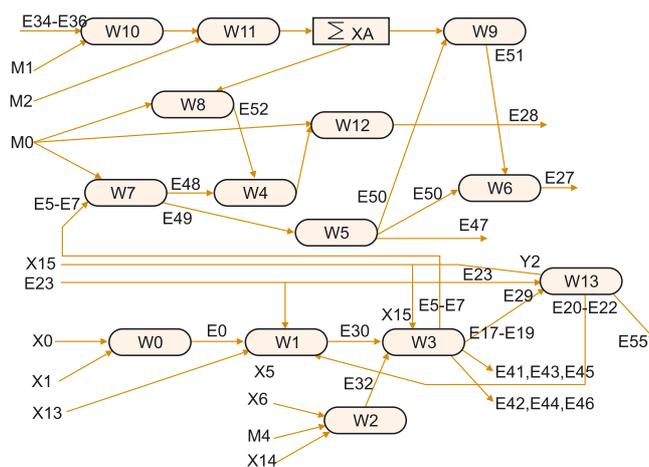


Рис. 6. Математическая модель процесса синтеза раствора ДХП для одной технологической нитки, где: W0 – W1 – операторы связей на этапе подготовки каустика; W2 – оператор связей на этапе подготовки хлора; W3 – оператор связей на этапе синтеза ХТК; W4 – W12 – операторы связей на этапе синтеза раствора ДХП; W13 – оператор связей, моделирующий работу санитарной колонны

базирующихся на стехиометрических соотношениях и коэффициентах обратимости протекающих реакций, позволяет разрабатывать системы управления по показателям качества для широкого класса химических процессов синтеза и ректификации для вновь разрабатываемых или модернизируемых производств.

Проведенные исследования позволили обосновать рациональность структуры модели для целей оперативного управления широкого класса объектов химических процессов синтеза с обратимыми реакциями.

Список литературы

1. Ошин Л.А. Промышленные хлорорганические продукты. М.: Химия. 1978.
2. Куликов Г.Г., Брейкин Т.В., Арьков В.Ю. Интеллектуальные информационные системы. Уфа. 1999.
3. Вережкин А.П., Ахметов С.А., Ишмияров М.Х., Докучаев Е.С., Малышев Ю.М. Технология, Экономика и автоматизация процессов переработки нефти и газа. М.: Химия. 2005.
4. Тарасов В.А., Марангозов С.В. Оптимизация производственных комплексов с переменными параметрами. М.: Энергоатомиздат. 1985.
5. Авхадеев В.В., Вережкин А.П. Управление процессом синтеза раствора дихлорпропанолов по показателю качества / Научно-практическая конф. "Промышленная экология. Проблемы и перспективы". Уфа. 2001.

Авхадеев Вадим Вилевич — канд. техн. наук, инженер ЗАО "Каустик".
Контактный телефон(3473)20-64-12.

Завершен проект газификации Неманского ЦБК

Специалисты ООО "НПФ "Ракурс" завершили комплекс работ по газификации Неманского ЦБК и переводу на газ двух котлоагрегатов К-50 ст.№1 и №2 с одновременным внедрением систем контроля и управления (СКУ) для них. Выполнены все подготовительные, монтажные и иные работы, необходимые для реализации проекта. 15 июля 2005 г. коллектив "Северо-Западной Лесопромышленной Компании" и ООО "Неманского целлюлозно-бумажного комбината" организовали торжественную церемонию, посвященную газификации предприя-

тия и запуску котлов ТЭЦ Неманского ЦБК для работы на природном газе. Инвестирование "Северо-Западной Лесопромышленной Компании" в газификацию комбината также является вложениями и в газификацию г. Неман Калининградской области. Участие специалистов НПФ "Ракурс" в столь значительном событии лишний раз подтверждает, что профессионализм коллектива и количественно-качественный рост достижений компании позволяет реализовывать крупные комплексные проекты АСУТП "под ключ".

[Http://www.rakurs.com](http://www.rakurs.com)