DOI: https://doi.org/10.33216/1998-7927-2024-283-3-47-52

УДК 541.515

# СИСТЕМИ КЕРУВАННЯ ТРЬОХПОЛОЧНИМ ГАЗОВИМ РЕАКТОРОМ У ВИРОБНИЦТВІ АМІАКУ З МОДЕЛЛЮ. РОЗРОБКА АЛГОРИТМУ

**Гурін О. М.**

# CONTROL SYSTEMS FOR A THREE-SHELF GAS REACTOR IN AMMONIA PRODUCTION WITH A MODEL. ALGORITHM DEVELOPMENT

**Gurin O. M.**

*В цій роботі представлений підхід до розробки системи керування з моделлю газового реактору синтезу аміаку. Комбінована форма моделі дозволяє використовувати переваги як експериментально-статистичного, так і детермінованого підходів, що забезпечує високу адекватність, легку адаптованість і широкий спектр застосувань — ключові аспекти при оптимізації та керуванні складними технологічними об'єктами. З використанням цього підходу створена модель триполичного газового реактору синтезу аміаку. На основі отриманих результатів розробляються програми для реалізації запропонованих алгоритмів в автоматизованій системі керування виробництвом аміаку, а також здійснюється їх адаптація для виробничих умов. Впровадження даної системи дозволить звузити діапазон параметрів технологічного процесу навколо оптимального значення, що приведе до значного економічного ефекту. Було розроблено уточнену інформаційно-логічну схему газового реактору синтезу аміаку, яка дозволила детально описати внутрішні зв'язки об'єкта керування та оцінити їх вплив на вихідні координати реактору. Створено алгоритм роботи системи керування з моделлю газового реактору синтезу аміаку, отримано загальний вигляд математичної моделі реактору з вбудованим внутрішнім теплообмінником, що дало змогу визначити рівняння критерію оптимальності роботи реактору. Запропонований підхід дозволяє, вирішивши оптимізаційну задачу, визначити такі значення витрат "холодних" байпасів, при яких реактор працюватиме в умовах, близьких до оптимальних. Це забезпечує швидкий перехід системи до області, близької до оптимальної. Після цього оптимальне значення концентрації метанолу на виході реактору синтезу визначається методом Хука-Дживса. моделі для наступної оптимізації й керування складним технологічним об'єктом. Виконано аналіз технологічного процесу синтезу аміаку як об'єкта керування. Розроблена математична модель полки газового реактору синтезу аміаку. Розроблена математична модель внутрішнього теплообмінника. Розроблено математична модель газового реактора синтезу аміаку. Для визначення невідомих параметрів математичної моделі запропоновано систему тестових впливів на трьохполочний газовий реактор шляхом змін витрат синтез-газу по холодним бай пасам на відому фіксовану величину. Отримано аналогічне рівняння четвертого ступеня, що повязує концентрацію аміаку на виході трьохполочного реактора з технологічними параметрами. Запропоноване рівняння може бути використано для розв'язування оптимізаційної задачі. На підставі отриманих результатів розробляються програми для реалізації запропонованих алгоритмів в АСУ ТП виробництва аміаку.*

***Ключові слова**: математиччна модель, складні технологічні об'єкти, інформаційно-логічна схема, об'єкт керування.*

**Вступ.** Підтримка оптимальних параметрів роботи багатотоннажних безперервних виробництв є актуальним завданням забезпечення їх прибутковості. Для вирішення цієї задачі слід розробити математичну модель процесу. Ця модель має бути зручною в використанні, мати порядок не більш чотирьох, та бути максимально адекватної процесу.

У хімічній промисловості широко застосовуються багатополочні реактори у виробництвах, де для забезпечення необхідних параметрів процесу в заданих областях

реакційного обсягу необхідно управляти ходом хімічної реакції. Наприклад, забезпечувати максимальний ступінь перетворення вихідних компонентів у цільові продукти зворотньої 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] Схематично багатополочний газовий реактор із вбудованим теплообмінником (для зручності розуміння показаний окремо), наведений на рис.1.

Мета роботи - розробити математичну модель трьохполочного газового реактора, яка дозволить провести оптимізацію роботи даного апарата.

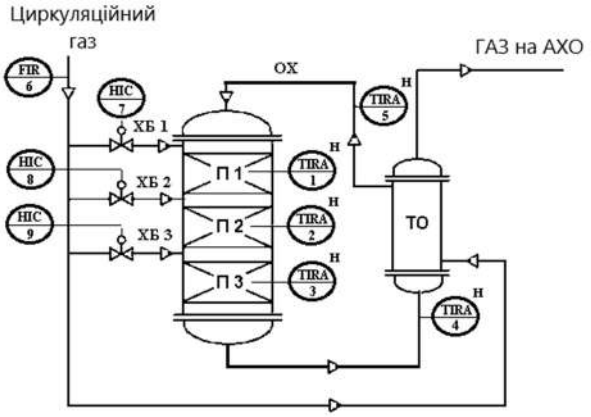


Рис.1. Схема трьохполочного газового реактора із вбудованим теплообмінником:
ТО – теплообмінник; П1, П2, П3 – перша, друга й третя полки з каталізатором; ОХ - потік основного ходу синтез-газу; ХБ1, ХБ2, ХБ3 – потоки холодних байпасів синтез-газу на відповідні полки реактора; АХО – аміачно-холодильне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

**Результати дослідження.** З точки зору керування, дані реактори є складними об'єктами, які характеризуються великою кількістю збурюючих параметрів і множинними внутрішніми зв'язками. Реактор працює в такий спосіб. Циркуляційний газ із температурою порядку 333$^0$С 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 порядку 430 $^0$С, подається на першу полицю реактора П 1; і холодний байпас, який, у свою чергу, поділяється на три потоки (дільник Д2) і призначений для підтримки температури на полках реактора П1 - П3 діапазоні 510 – 530$^0$С. На полках реактора протікає екзотермічна реакція синтезу аміаку. З виходу третьої полиці газ подається у вбудований теплообмінник ТО, де віддає своє тепло газу, що надходить у колону. [3]

Інформаційно-логічна схема трьохполочного газового реактора наведена на рис.2.

Умовимося називати вихідними параметрами параметри системи, які характеризують її стан і підтримка значень яких є метою системи регулювання. Регулюючі параметри – параметри, за допомогою яких ведеться регулювання (витрати матеріальних і енергетичних потоків). Збурюючи параметри – це параметри, що впливають на вихідні параметри, але не можуть бути регулюючими. [4]

Аналіз технологічного процесу, що відбувається в трьохполочному газовому реакторі, як об'єкту 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 даного 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 даного об'єкта є те, що для регулювання одного параметра – концентрації цільового компонента $Q_3$, використовуються три регулюючі параметри – витрати синтез-газу по холодним байпасам на полки реактора. До збурюючих параметрів відносяться: витрата циркуляційного *газу* $F_{ц.г.}$, його температура $T_{ц.г.}$ і концентрація цільового компонента на вході реактора $Q_0$. Тиск циркуляційного газу $P$ можна також віднести до збурюючих координат тому що, по-перше, цей параметр стабілізується компресором синтез-газу, а по-друге, при ступені перетворення синтез-газу в готовий продукт порядку 10% зменшення тиску за рахунок реакції становить приблизно 5%. Отже, при зміні ступеня перетворення в межах 8…12% тиск зміниться в межах 4…6%, що укладається в погрішність вимірювального каналу тиску. [5]

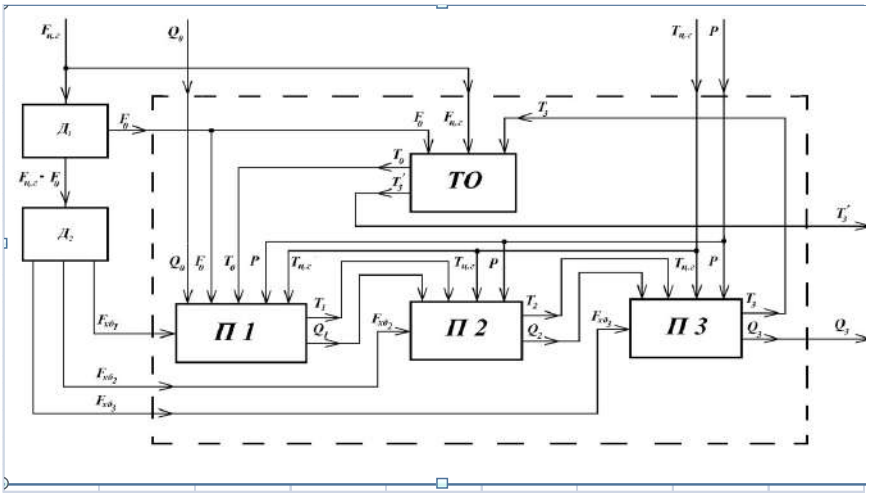


Рис. 2. Інформаційно-логічна схема трехполочного газового реактора із вбудованим теплообмінником: Д1, Д2 – математичні оператори розподілу потоку

Ціль оптимального керування газовим трьохполочним 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 трьохполочного газового реактора. Розробка математичної моделі включає два етапи. На першому етапі на основі матеріальних і теплових балансів кожної полиці трьох полочного газового реактора розробляється детермінована модель. Незважаючи на її невисоку точність, вона дає можливість оцінити вид крітеріальної функції в широкому діапазоні зміни аргументів з врахуванням її багато екстремальності, і виділити область глобального екстремуму. На другому етапі виконується адаптація моделі на основі експериментальних даних, що одержуються з об'єкта керування, на основі імовірнісних методів. Це дозволяє забезпечити точність параметрів, що моделюються, за рахунок врахування всіх збурюючих впливів. [5]

Створення адекватної моделі має на увазі 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 прибігати до наближених розв'язків, що знижує точність розроблювальної моделі. [6]

Алгоритм визначення математичної моделі колони синтезу аміаку схожий зі складанням ММ колони синтезу аміаку [3]. Для визначення ММ колони потрібно скласти дві часткові моделі: за концентрацією $Q$ цільового компонента (аміаку) та за температурою $T$.

Рівняння матеріального балансу за цільовим компонентом має вигляд:

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

де $dm_1$ – маса аміаку, яка потрапляє в реактор з першим потоком;

$dm_2$ – маса аміаку, яка потрапляє в реактор з другим потоком;

$dm_p$ – маса аміаку, яка утворюється в реакції;

$dm_v$ – маса аміаку, яка накопичується в реакторі об'ємом $V$;

$dm$ – маса аміаку, яка відводиться з реактора.

Запишемо рівняння (1) в технологічних змінних:

$$dm_1 = F_1 Q_1 \, dt, \quad (2)$$

де $F_1$ – витрата азотоводневої суміші по «основному» ходу на вході полиці, *кг/с*;

$Q_1$ – концентрація аміаку в потоці «основного» ходу, *мас.частка*;

$dt$ – приріст часу, *с*.

$$dm_2 = F_2 Q_2 \, dt, \quad (3)$$

де $F_2$ – витрата азотоводневої суміші по «холодному» байпасу на вході полиці, *кг/с*;

$Q_2$ – концентрація аміаку в «холодному» байпасі, *мас.частка*;

$$dm_p = \rho VK(Q - Q_{\text{п}})dt, \quad (4)$$

де ρ– густина азотоводневої суміші в реакторі (визначається з рівняння Менделєєва–Клапейрона), *кг/м*$^3$;

*V* – реакційний об'єм газового реактора, *м*$^3$;

*K* – швидкість хімічної реакції, 1/*с*;

*Q* і $Q_{\text{п}}$ – концентрація аміаку на виході та на вході полки реактора відповідно.

У випадку першої полки, концентрації аміаку в потоці «основного» ходу і «холодного» байпаса $Q_1$ і $Q_2$ рівні і в розрахунку їх можна прирівняти до величини $Q_{\text{п}}$. У випадку другої і третьої полки, концентрація аміаку $Q_{\text{п}}$ виходить в результаті змішування двох потоків і, відповідно, буде визначатися за формулою:

$$Q_n = \frac{F_1\ Q_1 + F_2\ Q_2}{F_1\ F_2}. \quad (5)$$

Залежність швидкості хімічної реакції *K* від температури процесу визначається рівнянням Ареніуса

$$K = K_0\, exp\left(-\frac{E}{RT}\right), \quad (6)$$

де $K_0$ – константа швидкості реакції, 1/*с*;

*E* – енергія активації реакції, *Дж/моль*;

*R* – універсальна газова постійна, *Дж/(моль К)*;

*T* – температура реакції, *К*.

$$dm_V = \rho V dQ, \quad (7)$$

де *ρ* –густина газової суміші реакторі, *кг/м*$^3$;

$V$ – вільний об'єм реактора, *м*$^3$;

*dQ* – зміна концентрації аміаку в реакторі, *мас. частка*.

$$dm = FQ\ dt, \quad (8)$$

де $F$ – витрата газової суміші на виході полки реактора, *кг/с*;

*Q* – концентрація аміаку на виході реактора, *мас. частка.*

В технологічних змінних рівняння набуває вигляду:

$$F_1Q_1\ dt + F_2Q_2\ dt + \rho VK_0\, exp\left(-\frac{E}{RT}\right)\left(Q - \frac{F_1Q_1 + F_2Q_2}{F_1 + F_2}\right)dt = \rho V dQ + (F_1 + F_2)Qdt, \quad (9)$$

Після необхідних математичних перетворювань (методика отримання математичних моделей викладена в [4]), отримаємо часткову модель полки колони синтезу аміаку у виробництві аміаку (без урахування часу запізнення) у канонічному вигляді.

$$\tau_1 \frac{dy_1}{dt} + y_1 = K_{11}x_1 + K_{12}z_1 + K_{13}z_3 + K_{14}z_4 + K_{15}z_5 + \text{К}_{16}y_2. \quad (10)$$

В рівнянні (10) позначення безрозмірних координат відповідають позначенням прийнятим на рис. 2. $K_{11}$, …, $K_{16}$ – безрозмірні коефіцієнти, а $\tau_1$ – постійна часу, що вимірюється в секундах.

Для того, щоб розробити часткову математичну модель полиці колони синтезу аміаку по температурі, необхідно скласти рівняння теплового балансу полиці (реактора). Тепло в реактор надходить з двома потоками вхідних реагентів та виділяється в процесі синтезу аміаку. Це тепло накопичується в об'ємі полиці (тепло накопичується в об'ємі каталізатора і в об'ємі азотоводневої суміші на полиці) і виходить з полиці витратою, що дорівнює сумі вхідних витрат. Загальне рівняння теплового балансу має вигляд:

$$dq_1 + dq_2 + dq_p = dq_V + dq, \quad (11)$$

де $dq_1$ – кількість тепла, яке надходить з першим потоком;

$dq_2$ – кількість тепла, яке надходить з другим потоком;

$dq_{\text{р}}$ – кількість тепла, яке виділяється в результаті реакції;

$dq_{\text{v}}$ – кількість тепла, яке накопичується в об'ємі полки;

*dq* – кількість тепла, яке виходить з вихідним потоком.

Запишемо рівняння теплового балансу в технологічних змінних.

$$dq_1 = F_1 \text{c}_1 T_1 dt, \quad (12)$$

де $F_1$ – витрата азотоводневої суміші по основному ходу, *кг/с*;

$c_1$ – теплоємність азотоводневої суміші в потоці основного ходу, *Дж/(кг К)*;

$T_1$ – температура потоку основного ходу на вході полки, *К*.

$$dq_2 = F_2 \text{c}_2 T_2 dt, \quad (13)$$

де $F_2$ – витрата азотоводневої суміші по «холодному» байпасу, *кг/с*;

$c_2$ – теплоємність потоку, що подається по «холодному» байпасу, *Дж/(кг К)*;

$T_2$ – температура потоку «холодного» байпаса, *К*.

$$dq_p = r\rho VK(Q - Q_n)\ dt, \qquad (14)$$

де $r$ – питома теплота реакції, *Дж/кг*;

$\rho$ – густина газової суміші в реакторі (визначається з рівняння Менделєєва–Клапейрона), *кг/м*$^3$;

$V$ – вільний об'єм газового реактора, *м*$^3$;

$K$ – швидкість хімічної реакції, *1/с*;

$Q$ і $Q_n$ – концентрація аміаку на виході й на вході до реактора відповідно, *мас. частка*.

$$dq_V = \rho Vc dT, \qquad (15)$$

де $\rho$ – густина газової суміші в реакторі (визначається з рівняння Менделєєва–Клапейрона), *кг/м*$^3$;

$V$ – вільний об'єм реактора, *м*$^3$;

$c$ – теплоємність газової суміші, що знаходиться в реакторі, *Дж/(кг К)*;

$dT$ – зміна температури в реакторі, *К*.

$$dq = FcT\ dt, \qquad (16)$$

де $F$ – витрата газу з реактора (визначається сумою витрат $F_1$ і $F_2$), *кг/с*;

$c$ – теплоємність газової суміші, яка виходить із реактора, *Дж/(кг К)*;

$T$ – температура в реакторі, *К*.

З урахуванням зазначеного, рівняння теплового балансу в технологічних змінних набуде вигляду

$$F_1c_1T_1dt + F_2c_2T_2dt + \\ + \frac{rPV}{RT}K_0\exp\left(-\frac{E}{RT}\right)\left(Q - \frac{F_1Q_1 + F_2Q_2}{F_1 + F_2}\right)dt = \\ = \frac{PVc}{RT}dT + (F_1 + F_2)cT\,dt. \qquad (17)$$

Після всіх перетворень модель набуде вигляду:

$$\tau_2\frac{dy_2}{dt} + y_2 = K_{21}x_1 + K_{22}z_1 + K_{23}z_2 + \\ + K_{24}z_3 + K_{25}z_4 + K_{26}z_5 + K_{27}z_6 + K_{28}y_1, \qquad (18)$$

де $\tau_2$ – стала часу, *с*; $K_{21}$; $K_{22}$ – коефіцієнти моделі.

Таким чином, маємо систему:

$$\begin{cases} \tau_1\frac{dy_1}{dt} + y_1 = K_{11}x_1 + K_{12}z_1 + K_{13}z_3 + K_{14}z_4 + K_{15}z_5 + K_{16}y_2 \\ \tau_2\frac{dy_2}{dt} + y_2 = K_{21}x_1 + K_{22}z_1 + K_{23}z_2 + K_{24}z_3 + K_{25}z_4 + K_{26}z_5 + K_{27}z_6 + K_{28}y_1. \end{cases} \qquad (19)$$

Рішення системи рівнянь щодо $y1$ є динамічною математичною моделлю полиці колони синтезу по концентрації, а по $y2$ – динамічною математичною моделлю по температурі.

**Висновки.**

У роботі запропоновано комбіновану математичну модель трьохполичного газового реактора у виробництві аміаку. Отримана математична модель має четвертий порядок, що дозволяє достатньо просто отримати функціональну залежність концентрації $Q_3$ цільового компоненту на виході трьохполичного газового реактора від вхідних регулюючих і збурюючих параметрів. Це рівняння може бути використано в якості критеріального рівняння при розв'занні оптимізаційної задачі. Розв'язком оптимізаційної задачі є значення витрат холодних байпасів, при яких у даних умовах концентрація $Q_3$ цільового компоненту на виході реаткора буде максимальною.

Математична модель, що розроблена може бути використана для побудови системи управління трьохполичним газовим реактором у виробництві аміаку з моделлю.

**Література**


1. В.А. Бейнарович. Самонастраивающиеся системы с эталонной моделью Доклады ТУСУРа, № 1 (21), часть 1, июнь 2010 с.67-69
2. О.В. Засядьвовк, А.В. Писаренко Синтез екстремальних систем керування ISSN 1811-4512. ElectronComm 2014, Vol. 19, №3(80)
3. С. Д. Земляков, В. Ю. Рутковский, Алгоритм функционирования адаптивной системы с эталонной моделью, гарантирующий заданную динамическую точность управления нестационарным динамическим объектом в условиях неопределенности, Автомат. и телемех., 2009, выпуск 10, 35–44
4. Method for on–line identification of a first order plus dead–time process model, Electronic Letters, 31(15), 1297–1298. https://doi.org/10.1049/el:19950865 Mandloi, R., & Shah, P. (2015).
5. Verhaegen M. Filtering and System Identification: A Least Squares Approach. 2 nd ed. / M. Verhaegen, V. Verdult. — Cambridge University Press, 2012. — 422 p.

6. Soderstrom T. Instrumental variable methods for system identification // Circuits, Systems and Signal Processing / T. Soderstrom, P. Stoica. 2002. Vol. 21, Issue 1. Pp. 1-9.
7. Абдалхамид Д. Разработка комбинированной модели для задач оптимизации / Д. Абдалхамид, М.Г. Лория, П.И. Елисеев, А.Б. Целищев // Наука и техника (международный научно-технический журнал): Минск БНТУ, 2014. №3. С. 209-213.

**References**

1. V.A. Beinarovych. Samonastrayvaiushchyesia systemы s эtalonnoi modeliu Dokladы TUSURa, № 1 (21), chast 1, yiun 2010 s.67-69
2. O.V. Zasiadvovk, A.V. Pysarenko Syntez ekstremalnykh system keruvannia ISSN 1811-4512. ElectronComm 2014, Vol. 19, №3(80)
3. S. D. Zemliakov, V. Yu. Rutkovskyi, Alhorytm funktsyonyrovanyia adaptyvnoi systemы s эtalonnoi modeliu, harantyruiushchyi zadannuiu dynamycheskuiu tochnost upravlenyia nestatsyonarnыm dynamycheskym obъektom v uslovyiakh neopredelennosty, Avtomat. y telemekh., 2009, vыpusk 10, 35–44
4. Method for on–line identification of a first order plus dead–time process model, Electronic Letters, 31(15), 1297–1298. https://doi.org/10.1049/el:19950865 Mandloi, R., & Shah, P. (2015).
5. Verhaegen M. Filtering and System Identification: A Least Squares Approach. 2 nd ed. / M. Verhaegen, V. Verdult. Cambridge University Press, 2012. 422 p.
6. Soderstrom T. Instrumental variable methods for system identification // Circuits, Systems and Signal Processing / T. Soderstrom, P. Stoica. 2002. Vol. 21, Issue 1. Pp. 1-9.
7. Abdalkhamyd D. Razrabotka kombynyrovannoi modely dlia zadach optymyzatsyy / D. Abdalkhamyd, M.H. Loryia, P.Y. Elyseev, A.B. Tselyshchev // Nauka y tekhnyka (mezhdunarodnыi nauchno-tekhnycheskyi zhurnal): Mynsk BNTU, 2014. №3. S.209-213.

**Gurin O. M. Control systems for a three-shelf gas reactor in ammonia production with a model. algorithm development**

*This paper presents an approach to the development of a control system with a model of a gas ammonia synthesis reactor. The combined form of the model allows to use the advantages of both experimental-statistical and deterministic approaches, which provides high adequacy, easy adaptability, and a wide range of applications - key aspects in the optimization and control of complex technological objects. Using this approach, a model of a three-polymer gas reactor for ammonia synthesis was created. Based on the results obtained, programs are being developed to implement the proposed algorithms in an automated ammonia production control system, and they are being adapted to production conditions. The implementation of this system will narrow the range of process parameters towards the optimal value, which will lead to a significant economic effect. A refined information-logic diagram of the gas ammonia synthesis reactor was developed, which allowed us to describe in detail the internal connections of the control object and assess their impact on the output coordinates of the reactor. An algorithm for the control system operation with a model of a gas ammonia synthesis reactor was created, and a general view of the mathematical model of the reactor with an integrated internal heat exchanger was obtained, which made it possible to determine the equation for the criterion of the reactor's optimal operation. The proposed approach makes it possible, by solving the optimization problem, to determine such values of the "cold" bypass flow rates at which the reactor will operate under conditions close to optimal. This ensures a rapid transition of the system to a region close to the optimum. After that, the optimum value of the methanol concentration at the outlet of the synthesis reactor is determined by the Hooke-Jeeves method. models for the subsequent optimization and control of a complex technological facility. The technological process of ammonia synthesis as a control object is analyzed. A mathematical model of a gas reactor shelf for ammonia synthesis was developed. A mathematical model of the internal heat exchanger was developed. A mathematical model of a gas reactor for the synthesis of ammonia was developed. To determine the unknown parameters of the mathematical model, a system of test effects on a three-shelf gas reactor by changing the flow rate of synthesis gas through cold bypasses by a known fixed value is proposed. A similar fourth-degree equation was obtained that relates the ammonia concentration at the outlet of the three-shelf reactor to the process parameters. The proposed equation can be used to solve an optimization problem. Based on the results obtained, programs are being developed to implement the proposed algorithms in the ammonia production process control system.*

***Keywords:*** *mathematical model, complex technological objects, information-logic scheme, control object.*

**Гурін Олександр Миколайович** – аспірант кафедри комп`ютерно-інтегрованих систем управління, Східноукраїнський національний університет імені Володимира Даля, gurin@ukr.net

Стаття подана 10.04.2024.