

УДК 62-5

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ПРОЦЕССА РЕКТИФИКАЦИИ ЭТАНОЛАМИНОВ

Н.П. Песков, Э.М. Мончарж, А.А. Попов, Н.О. Кулигина

Дзержинский политехнический институт (филиал) ФГБОУ ВПО «Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева»
Россия, 606026, г. Дзержинск Нижегородской обл., ул. Гайдара, 49

E-mail: peskov87@bk.ru

Рассматривается задача параметрической идентификации математической модели процесса ректификации этаноламинов при известной структуре объекта и неизвестных параметрах процесса массопередачи в системе диэтанолламин – триэтанолламин. Математическая модель процесса представляет собой аналитическое описание фундаментальных законов массопереноса. Неизвестными параметрами модели оказались объемный коэффициент массопередачи и коэффициенты формализованной зависимости, описывающей парожидкостное равновесие в системе диэтанолламин – триэтанолламин. Непосредственно измерить эти параметры не представляется возможным. Поэтому был предложен расчетно-экспериментальный метод идентификации для оценки параметров модели, базирующийся на минимизации суммы квадратов расхождений между расчетными и экспериментальными значениями выходных технологических параметров по серии опытов. Идентификация проведена по результатам эксперимента на промышленной установке по разделению смеси диэтанолламин – триэтанолламин в ректификационной колонне насадочного типа. Проведено тестирование разработанной математической модели и доказана ее адекватность, а также показано дальнейшее направление ее использования в задачах оптимального управления.

Ключевые слова: ректификация, математическая модель, идентификация параметров, управление процессом.

Этанолламины являются базовым сырьем и входят в состав рецептур готовых продуктов во многих отраслях народного хозяйства: от нефте- и газоперерабатывающей, цементной и металлургической до косметической, фармацевтической и сельскохозяйственной. К качеству этаноламинов предъявляются высокие требования.

В промышленности этаноламины получают в результате синтеза оксида этилена и аммиака. Заключительной стадией производства является разделение трехкомпонентной смеси моноэтанолламина (МЭА), диэтанолламина (ДЭА) и триэтанолламина (ТЭА) путем ректификации в двух колоннах насадочного типа. Управление работой последней из этих колонн по разделению ДЭА и ТЭА

Николай Павлович Песков, старший преподаватель кафедры «Автоматизация, транспортные и информационные системы».

Эрнст Маркович Мончарж (к.х.н., доц.), доцент кафедры «Автоматизация, транспортные и информационные системы».

Анатолий Аркадьевич Попов (к.т.н., доц.), доцент кафедры «Автоматизация, транспортные и информационные системы».

Наталья Олеговна Кулигина, старший преподаватель кафедры «Автоматизация, транспортные и информационные системы».

вследствие того, что оба ее выходных потока являются целевыми, требует регулирования состава как дистиллята, так и кубовой жидкости. Применение двух прямых или косвенных регуляторов состава дистиллята и кубовой жидкости из-за наличия перекрестных связей по управляющим воздействиям этих регуляторов приводит к их неустойчивой работе. Для решения данной проблемы предлагается использование математической модели в системе управления ректификационной колонной, позволяющей предсказывать состав дистиллята X_d (содержание ДЭА в дистилляте) и состав кубовой жидкости X_w (содержание ДЭА в кубовой жидкости) в зависимости от величины управляющих воздействий L (расход флегмы) и G (паропроизводительность кипятильника) соответственно. Таким образом, задача управления процессом ректификации может быть поставлена как задача оптимального управления, заключающаяся в поиске значений L и G с использованием математической модели, при которых величины X_d и X_w соответствуют технологическому регламенту. Найденные таким образом величины L и G выдаются в качестве заданий регуляторам, стабилизирующим эти технологические параметры [1].

Технологическая схема процесса бинарной ректификации представлена на рис. 1.

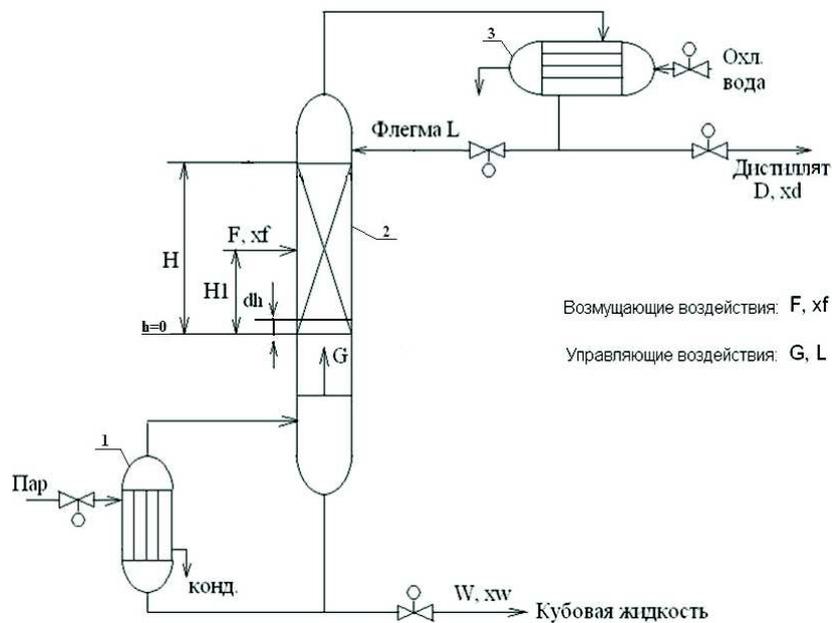


Рис. 1. Технологическая схема ректификации смеси диэтаноламин – триэтаноламин:
1 – выносной кипятильник; 2 – колонна; 3 – дефлегматор

Составим требуемую для решения задач управления процессом ректификации математическую модель, а затем определим ее параметры.

Расчет состава выходных потоков ректификационной колонны обычно проводится итерационным методом [2] с уточнением показателя состава кубовой жидкости X_w . По технологическому регламенту эта величина меняется от 0,2 до 0,3 кмоль/кмоль; в качестве начального приближения принималось среднее регламентное значение мольной доли низкотемпературного компонента (ДЭА) в кубовой жидкости $X_w^0 = 0,25$ кмоль/кмоль.

$$X_w = X_w^0. \quad (1)$$

В соответствии с общепринятым подходом гидродинамика процесса в кубовой части колонны описывается с помощью модели идеального смешения, поскольку в ней происходит кипение кубовой жидкости. Состав пара, поступающего из куба колонны на насадку, определяется уравнением равновесия пар – жидкость

$$Y_w = b_0 + b_1 X_w + b_2 X_w^2 + b_3 X_w^3, \quad (2)$$

где Y_w – содержание ДЭА в паровой фазе, кмоль/кмоль;
 X_w – содержание ДЭА в кубовой жидкости, кмоль/кмоль;
 b_0, b_1, b_2, b_3 – коэффициенты формализованной зависимости.

Гидродинамика процесса в насадке колонны описывается как модель идеального вытеснения, поскольку площадь поперечного сечения материальных потоков в насадке сравнительно мала. Модель идеального вытеснения представляется двумя дифференциальными уравнениями для жидкости и пара, определяющими изменения состава этих потоков по высоте насадки. Граничные условия для интегрирования дифференциальных уравнений определяются из уравнения материального баланса для кубовой части колонны. При значении координаты высоты сечения насадки $h = 0$ мольная доля низкотемпературного компонента в паровом потоке $Y = Y_w$, а в потоке жидкости

$$X = (GY_w + WX_w)/(L + F), \quad (3)$$

где G – расход пара, кмоль/ч;
 W – расход кубовой жидкости, кмоль/ч;
 L – расход флегмы, кмоль/ч;
 F – расход потока питания колонны, кмоль/ч.

Дифференциальное уравнение материального баланса для потока пара:

$$dY/dh = K_{OMP}(Y^* - Y)/G, \quad (4)$$

где K_{OMP} – объемный коэффициент массопередачи, кмоль/($m \cdot ч$);
 Y^* – равновесная мольная доля низкотемпературного компонента в паровой фазе, кмоль/кмоль;
 h – высота бесконечно малого элемента насадки, м.

Уравнение (4) справедливо для всей насадки. Дифференциальное уравнение материального баланса потока жидкости для части насадки, расположенной ниже подвода питания, принимает вид

$$dX/dh = K_{OMP}(Y^* - Y)/(L + F). \quad (5)$$

Аналогичное уравнение справедливо и для другой части насадки:

$$dX/dh = K_{OMP}(Y^* - Y)/L. \quad (6)$$

Уравнения (4) и (5) интегрируются до сечения по высоте насадки, соответствующего подаче на насадку питания ($h = H_1$), а затем интегрируются уравнения (4) и (6) до верхнего сечения насадки ($h = H$). При интегрировании дифференциальных уравнений (4), (5) и (6) величина равновесной мольной доли низкотемпературного компонента в паровой фазе Y^* определяется при переменных

значениях X по уравнению равновесия пар – жидкость, аналогичному уравнению (2):

$$Y^* = b_0 + b_1 X + b_2 X^2 + b_3 X^3. \quad (7)$$

Значение величины $Y_k = Y$, рассчитанной при $h = H$, соответствует составу пара, поступающего с насадки на дефлегматор. В приближении полной конденсации пара в дефлегматоре состав конденсата (флегма и дистиллят) имеет показатель состава $X_d = Y_k$. Уравнение материального баланса для всей колонны позволяет уточнить состав кубовой жидкости (найти расчетное значение) X_w^p :

$$X_w^p = (FX_f - DX_d) / W, \quad (8)$$

где X_f – содержание ДЭА в питании, кмоль/кмоль;

D – расход дистиллята, кмоль/ч.

Для уточнения значения величины X_w , принятой в качестве начального приближения, используется улучшенная итерационная процедура с инерционным множителем $\mu = 0,01 - 0,05$:

$$X_w = X_w + \mu(X_w^p - X_w). \quad (9)$$

Если погрешность итерационного расчета не соответствует допустимой погрешности ε ,

$$Abs|X_w^p - X_w| > \varepsilon,$$

то итерационный расчет повторяется начиная с расчета по уравнению (2). После достижения допустимой погрешности итерационный расчет завершается. Уравнения (1) – (9) и порядок их применения (моделирующий алгоритм) представляют собой математическую модель процесса ректификации, реализованного в насадочной колонне. Эта модель при наличии данных о значениях неуправляемых технологических параметров F и X_f , а также данных о значениях управляющих воздействий L и G позволяет определить значения выходных технологических параметров процесса D , W , X_w и X_d .

Блок-схема модели процесса ректификации представлена на рис. 2. Порядок применения уравнений на схеме при расчете математической модели представлен снизу вверх.

Для практического использования математической модели процесса ректификации с целью управления им необходимо определить ее параметры. К таким параметрам относится объемный коэффициент массопередачи K_{OMP} , используемый в уравнениях (4), (5) и (6). Кроме того, ввиду отсутствия данных по равновесию системы пар – жидкость компонентов ДЭА и ТЭА коэффициенты уравнений (2) и (7) (одинаковые по величине для обоих уравнений) также являются неизвестными параметрами математической модели процесса ректификационного разделения бинарной смеси ДЭА – ТЭА. Общее количество параметров рассматриваемой модели, подлежащих определению, составляет пять.

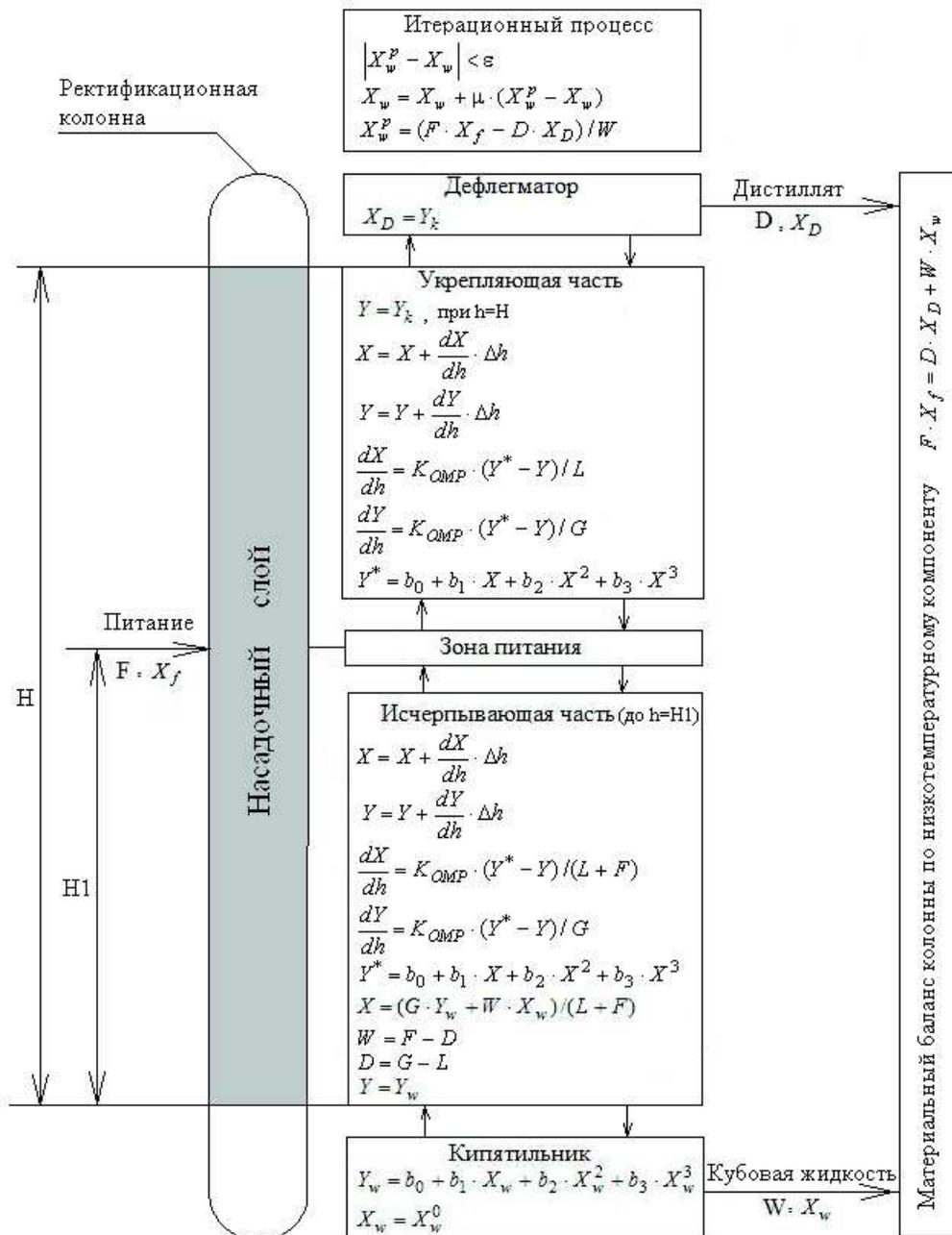


Рис. 2. Блок-схема модели процесса ректификации этаноламинов

Наличие математической модели, включающей пять неизвестных параметров, позволяет определить эти параметры с использованием опытных данных по промышленной эксплуатации процесса ректификации смеси ДЭА и ТЭА при наличии данных о работе колонны в различных режимах (не менее пяти), отличающихся значениями входных технологических параметров. Комплект опытных данных должен включать значения всех входных и выходных технологических параметров работы ректификационной колонны.

Опытные данные промышленной эксплуатации ректификационной колонны для определения параметров ее модели

F, расход питания Кмоль/ч	X _г , содержание ДЭА в питании Мол. доля	G, расход пара Кмоль/ч	L, расход флегмы Кмоль/ч	D, расход дистиллята Кмоль/ч	W, расход куб. жидкости Кмоль/ч	X _в , содержание ДЭА в кубе Мол. доля	X _д , содерж. ДЭА в дистилляте Мол. доля
16,01646	0,642768	18,04524	9,022622	9,022622	7,273639	0,215151	0,998535
16,03982	0,631353	17,54739	8,773696	8,773696	7,529917	0,216393	0,998535
13,83757	0,587692	13,5104	6,7552	6,7552	7,279471	0,217571	0,998534
17,23889	0,691288	21,5811	10,79055	10,79055	6,792929	0,21996	0,997802
15,28771	0,63118	16,64273	8,321365	8,321365	7,235554	0,222375	0,998535
15,92942	0,645355	17,88931	8,944653	8,944653	7,270948	0,224788	0,998535
15,94018	0,649883	17,83166	8,91583	8,91583	7,307031	0,237967	0,998535
15,06637	0,64296	15,88748	7,943739	7,943739	7,375699	0,27221	0,998535
15,6479	0,644405	17,12503	8,562513	8,562513	7,354614	0,245088	0,998535
14,49294	0,683005	17,54724	8,773621	8,773621	6,01203	0,237914	0,998535
15,2008	0,65375	17,16037	8,580186	8,580186	6,90133	0,239125	0,998535
14,87962	0,65429	16,93835	8,469175	8,469175	6,692288	0,233153	0,998535

Таблица 2

Данные промышленной эксплуатации колонны ректификации для тестирования адекватности ее модели

F, расход питания Кмоль/ч	X _г , содерж. ДЭА в питании Мол. доля	G, расход пара Кмоль/ч	Опытные данные				Расчет по модели			
			L, расход флегмы Кмоль/ч	D, расход дистиллята Кмоль/ч	W, расход куб. жидкости Кмоль/ч	X _в , содерж. ДЭА в кубе Мол. доля	X _д , содерж. ДЭА в дистилляте Мол. доля	X _в , содерж. ДЭА в кубе Мол. доля	X _д , содерж. ДЭА в дистилляте Мол. доля	
16,846	0,62765	18,176	9,0888	9,0888	7,758	0,2168	0,9984	0,2083	0,9931	
15,4428	0,58357	14,592	7,2958	7,2958	8,147	0,2236	0,9972	0,2294	0,9992	
15,4315	0,67234	17,237	8,6185	8,6185	6,813	0,2485	0,9985	0,2372	0,9946	
16,2282	0,64172	17,732	8,8662	8,8662	7,362	0,2217	0,9969	0,2133	0,9928	
14,3979	0,65435	15,040	7,5199	7,5199	6,878	0,2615	0,9976	0,2736	0,9965	

В данной работе для определения параметров модели собрана информация о двенадцати режимах функционирования ректификационной колонны (обучающая информация), разделяющей смесь ДЭА и ТЭА (табл. 1). Кроме обучающей информации здесь приводится информация еще о пяти режимах работы этой колонны для тестирования адекватности модели при найденных значениях ее параметров. Данная информация представлена в табл. 2, там же приводятся данные расчета показателей состава выходных потоков X_w и X_d , выполненного с использованием модели колонны. Для снижения погрешности опытных данных, представленных в табл. 1 и 2, выполнялся предварительный отбор таких данных, по которым соблюдался материальный баланс по расходам компонентов с погрешностью не более 1 % от величины расхода.

Экспериментальные данные, приведенные в табл. 1 и 2, после получения на производстве этаноламинов были предварительно преобразованы путем изменения размерности величин так, чтобы расходы потоков были выражены в размерности Кмоль/час и все показатели состава потоков – в мольных долях низкотемпературного компонента диэтаноламина. Мольная доля высокотемпературного компонента в соответствующем потоке определяется вычитанием из единицы мольной доли низкотемпературного компонента.

Обработка опытных данных с целью определения параметров модели процесса ректификации проводилась следующим образом. Для каждого из двенадцати режимов работы ректификационной колонны по значениям входных технологических параметров рассчитывались с использованием математической модели процесса величины выходных технологических параметров X_d^p и X_w^p (расчетные значения), которые сравнивались с экспериментальными значениями этих параметров для данного режима работы колонны. Сумма квадратов расхождений между расчетными и экспериментальными значениями выходных параметров по всем опытам рассматривалась как критерий оптимальности при выборе значений параметров математической модели:

$$Q = \sum (X_d^p - X_d^3)^2 + \sum (X_w^p - X_w^3)^2 .$$

Оптимальный выбор пяти параметров математической модели выполнялся путем минимизации критерия оптимальности Q методом Розенброка [3] с учетом ограничений на расчетные величины выходных технологических параметров. Эти ограничения относятся к расчетным величинам мольных долей низкотемпературного компонента в выходных потоках колонны и состоят в том, что они должны находиться в диапазоне от нуля до единицы:

$$0 < X_d^p < 1, \quad 0 < X_w^p < 1.$$

Результаты определения параметров модели для процесса ректификации в насадочной колонне представлены в табл. 3, там же даны стартовые значения (начало поиска) этих параметров и величины суммы квадратов расхождения между расчетными и опытными значениями выходных технологических параметров Q по всем опытам.

Уточнение значений параметров математической модели для процесса ректификации в результате применения метода наименьших квадратов оказалось существенным. Таким образом, поиск оптимальных значений параметров математической модели для процесса ректификации бинарной смеси ДЭА и ТЭА прошел успешно.

**Результаты определения параметров модели для процесса ректификации
в насадочной колонне**

Приближение	Параметры модели для процесса ректификации					Q
	K_{OMP}	b_0	b_1	b_2	b_3	
Стартовое	0,50781	0,1003	4,3613	-7,4548	4,1831	0,9479
Финальное	9,4597	0,6432	2,2979	-4,00032	2,104253	0,000582

Однако для установления адекватности составленной модели ректификации этаноламинов с найденными здесь значениями ее параметров необходимо сравнить дисперсии расхождения опытных и расчетных данных, полученных при обучении (см. табл. 3) и тестировании адекватности модели (см. табл. 2).

Дисперсия, достигнутая при обучении:

$$S_{ob}^2 = \frac{Q_{ob}}{f_{ob}},$$

где Q_{ob} – сумма квадратов расхождений, достигнутая при обучении;
 f_{ob} – число степеней свободы дисперсии обучения.

Согласно данным табл. 3: $Q_{ob} = 5.82 \cdot 10^{-4}$.

Значение f_{ob} определяется количеством опытных данных в табл. 1, количеством выходных параметров (X_d и X_w), количеством параметров модели, найденных по данным табл. 1:

$$f_{ob} = n \cdot m - k,$$

где n – количество опытных данных ($n = 12$);
 m – количество выходных параметров модели ($m = 2$);
 k – количество неизвестных параметров модели ($k = 5$).

Таким образом, дисперсия, достигнутая при обучении, равна

$$S_{ob}^2 = \frac{5.82 \cdot 10^{-4}}{19} = 3.063 \cdot 10^{-5}.$$

Сумма квадратов расхождений между опытными и расчетными данными по величинам X_d и X_w , полученная при тестировании адекватности модели (согласно данным табл. 2): $Q_t = 5.114 \cdot 10^{-4}$.

Дисперсия, достигнутая при тестировании:

$$S_t^2 = \frac{5.114 \cdot 10^{-4}}{10} = 5.114 \cdot 10^{-5}.$$

Дисперсионное отношение:

$$F = \frac{5.114 \cdot 10^{-5}}{3.063 \cdot 10^{-5}} = 1.67.$$

Критическое значение дисперсионного отношения при числе степеней свободы числителя $f_t = 10$, числе степеней свободы знаменателя $f_{ob} = 19$ и уровне значимости $\alpha = 0,05$ равно $F_{кр} = 2,38$ [4].

Поскольку $F < F_{кр}$, можно считать, что тестирование модели показало ее

адекватность с вероятностью 0,95. Таким образом, представленная модель может быть использована для управления технологическим процессом ректификации этаноламинов в насадочной колонне. Результаты исследования переданы в ООО «Синтез Ока» (г. Дзержинск Нижегородской области) для дальнейшего внедрения на предприятии. Полученные алгоритмы могут быть применены и на других производственных площадках для проведения ректификации бинарных смесей в колоннах насадочного типа с целью получения двух целевых продуктов.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Песков Н.П.* Система оптимального управления ректификацией этаноламинов с использованием математической модели процесса // Современные проблемы науки и образования. – 2011. – № 6. URL: www.science-education.ru/100-5076 (дата обращения: 27.07.2014).
2. *Гартман Т.Н., Клушин Д.В.* Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов: Учеб. пособие для вузов. – М.: Академкнига, 2006. – 416 с.
3. *Розенброк Х., Стори С.* Вычислительные методы для инженеров-химиков. – М.: Мир, 1968. – 444 с.
4. *Дерффель К.* Статистика в аналитической химии. – М.: Мир, 1994. – 268 с.

Статья поступила в редакцию 22 сентября 2015 г.

DEFINITION PARAMETERS OF MATHEMATICAL MODEL OF THE DISTILLATION PROCESS ETHANOLAMINE

N.P. Peskov, E.M. Moncharzh, A.A. Popov, N.O. Kuligina

Dzerzhinsky Polytechnic Institute (branch) of the federal state budgetary educational institution of higher professional education "Nizhny Novgorod State Technical University name R.E. Alexeyev"
49, Gaidar st., Dzerzhinsk, Nizhny Novgorod region, 606026, Russian Federation

The problem of parametric identification of the mathematical model of the process of rectification of ethanolamines in the known structure of the object and the unknown parameters of the process of mass transfer in the system of diethanolamine-triethanolamine. A mathematical model of the process is an analytical description of the fundamental laws of mass transfer. The unknown parameters of the model proved to surround the mass transfer coefficient and the coefficients according to a formalized, describing the vapor-liquid equilibrium in the system, diethanolamine-triethanolamine. Directly measure these parameters is not possible. Therefore, it was proposed settlement and experimental identification method to estimate the parameters of the model based on minimizing the sum of squares of the differences between the calculated and experimental values of the output of process parameters on a series of experiments. Identification results of the experiment conducted on an industrial plant for the separation of a mixture of diethanolamine-triethanolamine packing type distillation column. Testing of the developed mathematical model and prove its value, and shows the future direction of its use in optimal control problems.

Keywords: *distillation, mathematical model, parameter identification, process control.*

Nikolay P. Peskov, Senior Lecture.

Ernst M. Moncharzh (Ph.D (Chem.)), Associate Professor.

Anatoly A. Popov (Ph.D. (Techn.)), Associate Professor.

Nataliya O. Kuligina, Senior Lecture.