

Министерство образования и науки Российской Федерации ФЕДЕРАЛЬНОЕ  
ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ  
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н.Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Кафедра нефтехимии и техногенной безопасности

**Разработка математической модели адсорбера для работы в  
составе тренажера установки КЦА**

АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ

студента 4 курса 431 группы направления 18.03.01

«Химическая технология»

Института химии

Толстова Никиты Сергеевича

Научный руководитель

к.х.н., доцент

И.А. Никифоров

Заведующий кафедрой

д.х.н., профессор

Р.И. Кузьмина

Саратов 2016

**Введение.** Выпускная квалификационная работа посвящена созданию математической модели адсорбера короткоцикловой адсорбции, с последующим включением ее в тренажер обучения операторов, производства компании ЗАО «ИНИУС».

*Актуальность работы.* В связи с требованиями федеральных правил промышленной безопасности, при обучения операторов опасных химических производств, использовать компьютерные тренажерные комплексы, которые должны адекватно описывать процессы, протекающие в химических аппаратах, появилась необходимость разработки математических моделей. Так как без математических моделей, работа компьютерных тренажерных комплексов невозможна.

При создание компьютерных тренажерных комплексов ставят следующие цели:

- повышение безопасности и эффективности управления химико-технологическим процессом за счет приобретения технологическим персоналом практических навыков;
- приобретение персоналом навыков безопасного управления технологическими процессами в штатных и переходных режимах;
- проведение периодического контроля и тестирование уровня знаний и навыков ведения технологического процесса и локализации аварийных ситуаций;
- повышения качества подготовки рабочего и инженерно-технологического персонала, занятого ведением технологическим процессом и эксплуатации оборудования;
- снижение вероятности возникновения аварийных ситуаций по причине проявления человеческого фактора.

*Целью работы* являлось разработка математической модели адсорбера КЦА написанной с помощью JavaScript , для включения ее в состав тренажера установки КЦА производства компании ЗАО «ИНИУС».

При разработки модели были поставлены следующие задачи:

- определить характеристики объекта исследования, которые будут описаны в математической модели;
- провести математическое моделирование адсорбера;
- преобразовать математическую модель в компьютерную, с помощью языка программирования JavaScript;
- провести испытания и определить точность воспроизведения химико-технологического процесса.

Бакалаврская работа Толстова Никиты Сергеевича «Разработка математической модели адсорбера для работы в составе тренажера установки КЦА» представлена на 45 страницах и состоит из трех глав:

Глава 1 – Литературный обзор.

Глава 2 – Объект исследования.

Глава 3 – Расчетная часть.

**Основное содержание работы.** В *первой главе* выпускной квалификационной работы выполнен обзор научно-технической литературы по способам создания математических моделей, их видам и по программному обеспечению, позволяющему создавать компьютерные тренажерные комплексы.

Рассмотрена классификация модели по способу представления объекта.

Наряду с формальной классификацией, модели различаются по способу представления объекта:

Структурные или функциональные модели.

Структурные модели представляют объект как систему со своим устройством и механизмом функционирования.

Функциональные модели не используют таких представлений и отражают только внешне воспринимаемое поведение (функционирование) объекта. В их предельном выражении они называются также моделями «чёрного ящика». Возможны также комбинированные типы моделей, которые иногда называют моделями «серого ящика».

Математические модели сложных систем можно разделить на три типа:

Модели типа чёрный ящик (феноменологические);

Модели типа серый ящик (смесь феноменологических и механистических моделей);

Модели типа белый ящик (механистические, аксиоматические).

Так же был проведен поиск компаний, которые представляют программное обеспечение для создания компьютерного тренажерного комплекса. По результатам поиска были определены ряд компаний представленный в таблице 1.

Таблица 1- Программное обеспечение, для создания тренажерных комплексов.

Название программного обеспечения	Компания производитель	Страна
OMEGALAND	Yokogawa Electric Corporation	Япония
UniSim Design Suite R440	Honeywell International, Inc.	США
Универсальный тренажерный комплекс (УТК)	ЗАО «ИНИУС»	Российская федерация
CHEMCAD 7.0	Chemstations Inc.	Германия

Во второй главе выпускной квалификационной работы описывается объект исследования. Объектом исследования является адсорбер установка КЦА для

производства продуктового потока высокочистого водорода, работающей в основном режиме.

Установка КЦА, состоит из 6 пар адсорберов, параллельно подключенных к сырьевой линии, системы клапанных модулей с технологическими клапанами и трубопроводами и системы управления. В установке применяется метод короткоциклового адсорбции для очистки сырьевого газового потока, с целью получения высокочистого водорода. Примеси, присутствующие в сырье, адсорбируются на стадии адсорбции адсорбентом при высоком давлении (давление адсорбции) и десорбируются на стадии десорбции, при более низком давлении (давление десорбции).

Адсорбер установки КЦА – это аппарат высоко давления, вертикального типа, имеющий штуцеры для подвода и отвода обрабатываемой газовой смеси заполненный слоями адсорбента, попеременно соединяющийся с сырьевой линией ВСГ, которая находится под наибольшим давлением, и с линией отходящего газа, находящейся под наименьшим давлением в цикле.

При режиме адсорбции сырьевой газ (ВСГ) подается через штуцер подвода сырья в нижнюю часть адсорбера и примеси удерживаются в слое адсорбента.

Процесс происходит при давлении в 2,03 МПа.(изб.) и температуре 38 °С.

Очищенный водород выводится из верхней части адсорбера через штуцер отвода продукта.

При регенерации адсорбента давление в адсорбере понижается до 0,035

МПа.(изб.) и температуры 28 °С.

Третья глава посвящена расчетной части выпускной квалификационной работы. В ней описаны последовательность действий при составлении математической модели.

Первоначально были определены исходные данные, такие характеристики входного потока как, его состав, давление, температура. Так же были определены характеристики самого адсорбера: высота, диаметр, объем, высота насыпного слоя адсорбента.

При разработке математической модели были введены некоторые допущения:

- Первое допущение – слой адсорбента представлен системой одинаковых частей – ступеней, причем каждая ступень состоит из двух одинаковых частей: газовая фаза и твердый адсорбент.

Объем газовой части любой из ступеней одинаков и равен  $V_g$ , а объем твердой фазы любой из ступеней одинаков и равен  $V_s$ , число ступеней равно  $n$ . Сумма всех объемов твердой фазы по всем ступеням равна общему количеству вещества адсорбента в слое. Объем газовой смеси,

$m^3$

подлежащей разделению равен  $F( \quad )$ , концентрация адсорбтива в

$m$

разделяемом объеме равна  $C_0$  (моль/  $\quad$  ). Концентрации

сорбирующихся компонентов в газовой и твердой фазах на  $i$ -ой ступени соответственно равны  $c_g^i$  и  $c_s^i$ .

- Второе допущение - каждое вещество смеси адсорбируется на отдельном слое адсорбента.
- Третье допущение - перепад давления по длине слоя отсутствует.

В данной главе выведены и записаны в дифференциальной и интегральной форме уравнения теплового и материального баланса.

Разработанная и записанная математическая модель была преобразована в компьютерную, с помощью языка программирования JavaScript.

Записанную на языке программирования JavaScript математическую модель адсорбера КЦА, включили в универсальный тренажерный комплекс, компании ЗАО «ИНИУС» и произвели запуск модели. Воспроизведя регламентный режим установки короткоцикловой адсорбции. Полученные данные представлены в таблице 2.

Таблица 2. Данные, рассчитанные моделью.

Параметр	Сырье	Продукт
Расход, Нм <sup>3</sup> /ч	161 000	106 000
Давление, МПа(изб.)	2,0	1,93
Температура, °С	38,1	43
Состав, моль(%).		
Водород	75,9	98,9
Азот	0,027	баланс
Окись Углерода	4,11	10 ppm.
Углекислый Газ	16,15	--
Метан	3,5	баланс
Вода	0,31	--
Состав, мол. вес	10,4	2,02

При сравнение с исходными данными, определяется погрешность, составляющая не более пяти процентов. Так же при критических изменениях в исходных условиях, компьютерная модель, выдает сообщение об ошибки.

На основе данных приведенных в таблице 3, можно сказать, что модель является достаточной с точки зрения поставленной задачи. Защищенной от абсурдных ответов.

Таблица 3. Данные, с рабочей установки КЦА.

Параметр	Сырье	Продукт
Расход, Нм <sup>3</sup> /ч	160 000	107 000
Давление, МПа(изб.)	2,0	1,93
Температура, °С	38	43
Состав, моль(%).		
Водород	76	99,9
Азот	0,03	баланс
Окись Углерода	4	10 ppm.
Углекислый Газ	16	--
Метан	4	баланс
Вода	0,31	--
Состав, мол. вес	11	2

Полученные данные позволяют использовать описанную в данной работе математическую модель адсорбера КЦА для включения ее в тренажерный комплекс, для обучения операторов опасных химических производств.

Так же, необходимо расширять и усложнять данную модель, для возможности моделирования других режимов работы установки КЦА.

Одним из актуальных дополнений данной модели, является включение математического описания процессов хемосорбции протекающих на поверхности адсорбента.

**Заключение.** После проведения анализа испытаний компьютерной модели, можно сделать вывод о том, что математическая модель удовлетворяет условиям поставленной задачи. Данная модель может быть использована для обучения операторов опасных химических производств. Математическая модель может адекватно воспроизводить производственный режим.

Данная математическая модель не позволяет исследовать другие режим и условия работы адсорбера КЦА, она не является универсальной. В дальнейшем модель может быть усовершенствована.

Таким образом, по итогам выполненной работы можно сделать следующие выводы:

1. Разработана математическая модель адсорбера с габаритами:

Диаметр – 2900 (мм)

Высота – 8000 (мм)

Объем – 52,84

заполненного цеолитным сорбентом, реализованная в виде программы в среде JavaScript, данная модель может работать в динамическом режиме, в составе тренажерного комплекса установки КЦА.

2. Сравнение работы тренажерного комплекса с работой реальной установки показывает совпадение основных параметров процесса, с точностью до 5%.

#### **Список используемой литературы**

1. А. И. Уёмов Логические основы метода моделирования, М.: Мысль, 1971. — 311 с, с.48
2. Безручко Б. П., Смирнов Д. А. Математическое моделирование и хаотические временные ряды. — Саратов: ГосУНЦ «Колледж», 2005
3. Советов Б. Я., Яковлев С. А. Моделирование систем: Учеб. для вузов — 3-е изд., перераб. и доп. — М.: Высш. шк., 2001- 6 с.
4. Кузнецов В.Л. Математическое моделирование: Учебное пособие.- М.: МГТУГА, 2003 – 11 с.
5. Мышкис А. Д., Элементы теории математических моделей. — 3-е изд., испр. — М.: КомКнига, 2007. — 192 с.
6. Kalmykov LV, Kalmykov VL. (2015) A white-box model of S-shaped and double S-shaped single-species population growth. PeerJ 3:e948
7. Холоднов В.А., Дьяконов В.П. Математическое моделирование и оптимизация химико-технологических процессов. Практическое руководство – СПб.: АНО НПО «Профессионал», 2003. – 480 с.
8. Липин, А.Г. Математическое моделирование химико - технологических систем: учебное пособие/ А.Г.Липин; Иван. гос. хим.-технол. ун-т. Иваново,2008.
9. Кафаров В.В. Методы кибернетики в химии и химической технологии. — М.: Химия, 1985. – 489 с.
10. Закгейм А.Ю. Введение в моделирование химико-технологических процессов. – М.: Химия, 1982 с.

11. Пахомов А.Н. Коновалов А.Н. и др. Основы моделирования хими-ко-технологических систем: учеб. пособие. – Тамбов: Изд-во Тамб. гос. техн. ун-та, 2008. – 80 с.
12. Гумеров А.Н., Валеев А.Н и др. Математическое моделирование химико-технологических процессов: учеб. пособие. – М.: КолосС, 2008. – 160 с.
13. Бондарь А.Г. Математическое моделирование в химической технологии. – М.: Высш. шк., 1973. – 280 с.
14. <http://www.yokogawa.ru/>
15. [http://www.omegasim.co.jp/index\\_e.htm](http://www.omegasim.co.jp/index_e.htm)
16. <http://www.inius.ru/obschie-svedenija.html>
17. <https://honeywell.com/country/ru/Pages/home.aspx>
18. <http://www.chemstations.com/>
19. В.Г. Матвейкин, В.А. Погонин, С.Б. Путин, С.А. Скворцов  
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И УПРАВЛЕНИЕ  
ПРОЦЕССОМ КОРОТКОЦИКЛОВОЙ АДСОРБЦИИ «Издательство  
Машиностроение-1» 107076, Москва, Стромьинский пер., 4
20. Сафонов, М.С. Химия в высшей школе. Химическая технология / М.С. Сафонов. – М.: Изд-во Химфака МГУ, 2002. – 70 с.
21. Глупанов, В.М. Получение азота и кислорода адсорбционным разделением воздуха / Глупанов В.Н., Шумяцкий Ю.И., Серегин Ю.А. Сер. ХМ-4. – М.: ЦИНТИНЕФТЕМАШ, 1991. – 47с.
22. Матвейкин, В.Г. Математическое моделирование и управление процессом короткоциклового адсорбции / В.Г. Матвейкин, В.А. Погонин, С.Б. Путин, С.А. Скворцов. – М.: Изд-во машиностроение-1, 2007. – 133 с.
23. Гуревич И.Л. Технология переработки нефти и газа. Часть 1. Общие свойства и первичные методы переработки нефти и газа. – Москва: Химия, 1972. - 360 с.
24. Письмен М.К. Производство водорода в нефтеперерабатывающей промышленности - Москва: Химия, 1976. - 208 с.
25. П.В. Сытников, В.А. Собянин .Новые перспективные методы производства и использование водорода- Москва: Калвис, 2006 г.
26. Устинов, Е.А. Моделирование циклических адсорбционных процессов раз- деления газов / Е.А. Устинов // Журнал прикладной химии. – 1980. – Т.53. – №1. – С. 136-141.
27. Хейфиц, Л.И. Избранные главы химической технологии. Элементы теории процессов разделения газовых смесей / Л.И. Хейфиц, В.Л. Зеленко, Ю.В. Павлов. – М.: Изд-во Химфака МГУ, 2004. – 69 с.

