

## МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ РЕАКТОРА–СМЕСИТЕЛЯ СТАДИИ СИНТЕЗА ЭТАНОЛАМИНОВ

<sup>1</sup>Сажин С. Г., <sup>1</sup>Пенкин К. В.

<sup>1</sup>*Дзержинский политехнический институт (филиал) ФГБОУ ВПО «Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева», Дзержинск, Нижегородская обл., Россия (606023, Нижегородская обл., г. Дзержинск, б-р Мира, д.21, кафедра «Автоматизация и информационные системы»), e-mail: [avtomat@sinn.ru](mailto:avtomat@sinn.ru)*

В статье рассмотрено математическое моделирование процессов в реакторе смешения стадии синтеза. Целевыми выходными продуктами производства являются моноэтаноламин, диэтаноламин и триэтаноламин. Эти продукты получаются в результате взаимодействия окиси этилена с аммиаком. В работе проведено преобразование системы входных, управляющих и выходных параметров в укрупненные комплексы параметров, что позволяет в дальнейшем использовать при математическом моделировании. Подробно рассмотрена блок-схема модели реактора-смесителя стадии синтеза этаноламина. Блок-схема позволяет четко определить параметры состояния и выходные параметры процесса. Математическая модель реактора-смесителя при получении всех модификаций этаноламинов, в том числе моноэтаноламинов, диэтаноламинов и триэтаноламинов, имеет вид системы дифференциальных уравнений с соответствующими начальными условиями. Для установившегося режима работы реактора-смесителя стадии синтеза математическая модель выполнена в виде системы нелинейных алгебраических уравнений. Использование этой системы позволило в конечном итоге максимизировать выход моноэтаноламина в процессе синтеза.

Ключевые слова: этаноламин, моноэтаноламин, математические методы, управление

## MATHEMATICAL MODEL OF THE SYNTHESIS REACTOR STAGE OF THE SYNTHESIS OF ETHANOLAMINE

<sup>1</sup>Sazhin S.G., <sup>1</sup>Penkin K. V.

<sup>1</sup>*Dzerzhinsky Polytechnic Institute, Nizhny Novgorod State Technical University n.a. R.E. Alekseev, Dzerzhinsk, Nizhniy Novgorod region, Russia (606023, Nizhegorodskaya obl., Dzerzhinsk, b. World, 21, Department of «Automation and information systems»), e-mail: [avtomat@sinn.ru](mailto:avtomat@sinn.ru)*

The article describes the mathematical modeling of the reactor mixing stage of the synthesis. Target output products produced are monoethanolamine, diethanolamine and triethanolamine. These products are obtained by reacting ethylene oxide with ammonia. In the paper the transformation of the input, management and output parameters into larger complexes of parameters that can then be used in mathematical modeling. The article details the scheme model of the reactor stage of the synthesis of ethanolamine. Scheme allows you to clearly define the parameters of the state and the output parameters of the process. A mathematical model of the reactor at obtaining all modifications ethanolamines, including monoethanolamine, diethanolamine and triethanolamine, has the form of differential a system with appropriate initial conditions. For steady state operation of the reactor stage synthesis mathematical model is implemented as a system of nonlinear algebraic equations. Using this system allowed ultimately maximize the yield of monoethanolamine in the synthesis process.

Keywords: ethanolamine, monoethanolamine, mathematical methods, management

Исследуемый технологический процесс реализован в реакторах непрерывного действия и представляет собой многомерный объект с внутренним и внешним рециклами для проведения сложных последовательно-параллельных реакций.

Системный анализ процесса синтеза как объекта управления с большим числом одновременно и совокупно действующих факторов выполнен с помощью статических методов. Целевыми продуктами производства являются моноэтаноламин (МЭА),

диэтанолламин (ДЭА) и триэтанолламин (ТЭА) – продукты взаимодействия окиси этилена с аммиаком. Это выходные параметры объекта управления:

$Y_1$  – доля МЭА в реакционной смеси на выходе из узла синтеза (%),

$Y_2$  – доля ДЭА (%) в реакционной смеси и

$Y_3$  – доля ТЭА (%) в реакционной смеси.

В качестве входных, постоянно контролируемых в ходе процесса факторов, приняты следующие:

$X_1$  – расход окиси этилена (ОЭ) ( $\text{м}^3/\text{час}$ ),

$X_2$  – расход  $\text{NH}_3$  ( $\text{м}^3/\text{час}$ ),

$X_3$  – расход МЭА ( $\text{м}^3/\text{час}$ ),

$X_4$  – подача пара в узел синтеза ( $\text{м}^3/\text{час}$ ),

$X_5$  – температура в верхней части реактора синтеза ( $^\circ\text{C}$ ),

$X_6$  – температура в нижней части реактора синтеза ( $^\circ\text{C}$ ),

$X_7$  – температура в смесителе ( $^\circ\text{C}$ ),

$X_8$  – давление в смесителе ( $\text{кг}/\text{см}^2$ ).

Блок-схема объекта управления представлена на рис. 1.



Рис. 1 Блок-схема объекта управления

Если объединить целевые (выходные) переменные узла синтеза, вектор  $Y(Y_1, Y_2, Y_3)$ , входные параметры управления узла синтеза, вектор  $U(X_1, X_2, X_3, X_4, X_5, X_6, X_7, X_8)$ , параметры состояния реактора, вектор  $X_c(X_7, X_8)$ , схема будет упрощена (рис. 2).

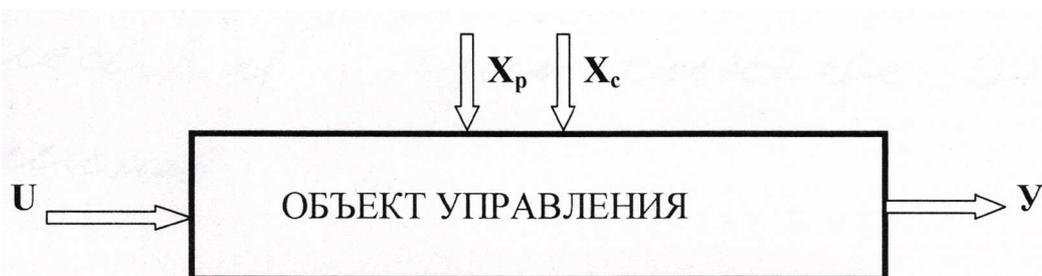


Рис. 2 Упрощенная блок-схема объекта управления

Процесс синтеза этаноламинов осуществляется в двух непрерывно-действующих реакторах: реакторе смешения (РС) и реакторе вытеснения (РВ). Аппаратурное оформление процесса позволяет осуществлять интенсивный теплообмен в зоне реакции и обеспечивать устойчивое протекание процесса в широком диапазоне соотношений исходных компонентов в зоне реакции. В основу производства положена технология получения этаноламинов из окиси этилена и аммиака с использованием продуктов реакции – этаноламинов – в качестве катализаторов основной реакции. Процесс проводится в большом (15 – 20) избытке аммиака с возвратом не прореагировавшего аммиака в зону реакции. Предусмотрен также возврат в зону реакции части моноэтаноламина после его выделения из реакционной смеси.

Основной этап синтеза этаноламинов реализуется в реакторе-смесителе (РС). В аппарат подается окись этилена, аммиак со склада и возвратный не прореагировавший аммиак из узла синтеза, а также моноэтаноламин как авто катализатор. На выходе смесителя имеем смесь этаноламинов и не прореагировавших компонентов: аммиак и окись этилена. Не прореагировавший аммиак возвращается на вход в реактор-смеситель. Основу математической модели процесса оксиэтилирования аммиака в реакторе-смесителе составляют кинетический блок и балансовые уравнения по компонентам реакционной смеси.

В смесителе организовано достаточно интенсивное перемешивание реакционной смеси. При разработке модели можно принять предположение об идеальном смешении и, следовательно, параметры состояния реакционной смеси в реакторе являются также и выходными параметрами объекта.

Блок-схема модели реактора-смесителя представлена на рис. 3.

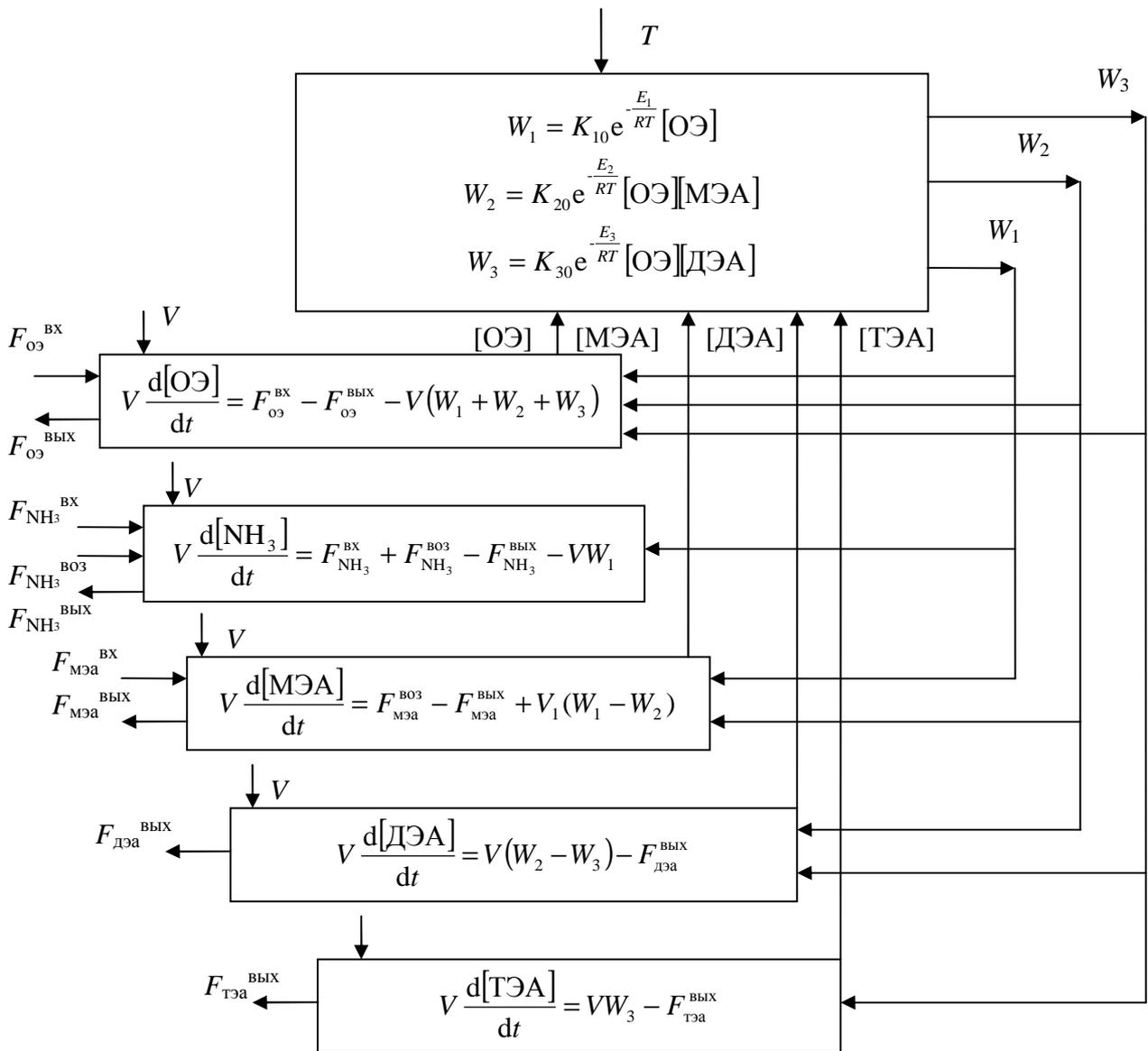


Рис. 3 Блок-схема модели реактора-смесителя

На рис. 3 присутствуют следующие обозначения:

$T$  – температура в реакторе, °С,

$V$  – объем реактора, м<sup>3</sup>,

$[\text{OЭ}]$ ,  $[\text{NH}_3]$ ,  $[\text{MЭА}]$ ,  $[\text{ДЭА}]$ ,  $[\text{ТЭА}]$  – концентрации компонентов реакционной смеси в реакторе, кг/м<sup>3</sup>,

$F_{\text{OЭ}}^{\text{ВХ}}$ ,  $F_{\text{OЭ}}^{\text{ВЫХ}}$ ,  $F_{\text{NH}_3}^{\text{ВХ}}$ ,  $F_{\text{NH}_3}^{\text{ВОЗ}}$ ,  $F_{\text{NH}_3}^{\text{ВЫХ}}$ ,  $F_{\text{MЭА}}^{\text{ВХ}}$ ,  $F_{\text{MЭА}}^{\text{ВЫХ}}$ ,  $F_{\text{ДЭА}}^{\text{ВЫХ}}$ ,  $F_{\text{ТЭА}}^{\text{ВЫХ}}$  – входные и выходные потоки по компонентам, кг/ч.

Блок-схема позволяет четко определить входные факторы объекта, параметры состояния и выходные параметры процесса, а также конструкционные и технологические параметры и все взаимосвязи параметров в процессе производства. Блок-схема также является основой при решении системы с помощью численных методов интегрирования.

Математическая модель реактора-смесителя для получения этаноламинов имеет вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} V \frac{d[\text{OЭ}]}{dt} = F_{\text{OЭ}}^{\text{BX}} - F_{\text{OЭ}}^{\text{ВЫХ}} - V(k_1[\text{OЭ}] + k_2[\text{OЭ}][\text{МЭА}] + k_3[\text{OЭ}][\text{ДЭА}]), \\ V \frac{d[\text{NH}_3]}{dt} = F_{\text{NH}_3}^{\text{BX}} + F_{\text{NH}_3}^{\text{ВОЗ}} - F_{\text{NH}_3}^{\text{ВЫХ}} - V k_1[\text{OЭ}], \\ V \frac{d[\text{МЭА}]}{dt} = F_{\text{МЭА}}^{\text{ВОЗ}} - F_{\text{МЭА}}^{\text{ВЫХ}} + V(k_1[\text{OЭ}] - k_2[\text{OЭ}][\text{МЭА}]), \\ V \frac{d[\text{ДЭА}]}{dt} = V(k_2[\text{OЭ}][\text{МЭА}] - k_3[\text{OЭ}][\text{ДЭА}]) - F_{\text{ДЭА}}^{\text{ВЫХ}}, \\ V \frac{d[\text{ТЭА}]}{dt} = V k_3[\text{OЭ}][\text{ДЭА}] - F_{\text{ТЭА}}^{\text{ВЫХ}}. \end{array} \right. \quad (1)$$

Начальные условия:

$$\begin{aligned} [\text{OЭ}(t=0)] &= [\text{OЭ}]_0, \\ [\text{NH}_3(t=0)] &= [\text{NH}_3]_0, \\ [\text{МЭА}(t=0)] &= [\text{МЭА}]_0, \\ [\text{ДЭА}(t=0)] &= 0, \\ [\text{ТЭА}(t=0)] &= 0. \end{aligned}$$

В установившемся режиме работы реактора математическая модель представляет систему нелинейных алгебраических уравнений:

$$\left\{ \begin{array}{l} F_{\text{OЭ}}^{\text{BX}} - F_{\text{OЭ}}^{\text{ВЫХ}} - V(k_1[\text{OЭ}] + k_2[\text{OЭ}][\text{МЭА}] + k_3[\text{OЭ}][\text{ДЭА}]) = 0, \\ F_{\text{NH}_3}^{\text{BX}} + F_{\text{NH}_3}^{\text{ВОЗ}} - F_{\text{NH}_3}^{\text{ВЫХ}} - V k_1[\text{OЭ}] = 0, \\ F_{\text{МЭА}}^{\text{ВОЗ}} - F_{\text{МЭА}}^{\text{ВЫХ}} + V(k_1[\text{OЭ}] - k_2[\text{OЭ}][\text{МЭА}]) = 0, \\ V(k_2[\text{OЭ}][\text{МЭА}] - k_3[\text{OЭ}][\text{ДЭА}]) - F_{\text{ДЭА}}^{\text{ВЫХ}} = 0, \\ V k_3[\text{OЭ}][\text{ДЭА}] - F_{\text{ТЭА}}^{\text{ВЫХ}} = 0. \end{array} \right. \quad (2)$$

Используя систему уравнений (2), оказывается возможным, воздействуя на расход окиси этилена (OЭ), обеспечить максимальное значение моноэтаноламина в реакционной смеси стадии синтеза.

### Список литературы

1. Кулямин В. В. Технология программирования. – М.: ИНТУИТ–Бином, 2007. – 464 с.
2. Макконелл Дж. Анализ алгоритмов. – М.: Техносфера, 2002. – 304 с.
3. Партыка Т. Л., Попов И. И. Математические методы. – М.: Форум Инфра–М, 2007. – 463 с.
4. Сухарев М. Теория и практика программирования. – СПб.: БхВ – Петербург, 2007. – 349 с.
5. Шапкин А. С., Мазаева Н. П. Математические методы и модели исследования операций. – М.: Издательство «Дашков и К°», 2004. – 470 с.

**Рецензенты:**

Никандров И.С., д.т.н., профессор, профессор кафедры «Автомобильный транспорт и механика» Дзержинского политехнического института (филиал) НГТУ, ФГБОУ ВПО Нижегородский государственный технический университет им. Р. Е. Алексеева Дзержинский политехнический институт (филиал), Министерство образования РФ, г. Дзержинск.

Сидягин А.А., д.т.н., профессор, профессор кафедры «Машины и аппараты химической и пищевой производств», ФГБОУ ВПО Нижегородский государственный технический университет им. Р. Е. Алексеева Дзержинский политехнический институт (филиал), Министерство образования РФ, г. Дзержинск.